

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

**UMA METODOLOGIA DE OTIMIZAÇÃO APLICADA A PROBLEMAS MODELADOS
PELAS EQUAÇÕES DE NAVIER STOKES**

**Dissertação submetida à
UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA**

**para a obtenção do grau de
MESTRE EM ENGENHARIA MECÂNICA**

RODRIGO FERRAZ DE ANDRADE FLORES DA SILVA

Florianópolis, dezembro de 2007

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA**

**UMA METODOLOGIA DE OTIMIZAÇÃO APLICADA A PROBLEMAS MODELADOS
PELAS EQUAÇÕES DE NAVIER STOKES**

RODRIGO FERRAZ DE ANDRADE FLORES DA SILVA

**Esta dissertação foi julgada adequada para a obtenção do título de
MESTRE EM ENGENHARIA
ESPECIALIDADE ENGENHARIA MECÂNICA
sendo aprovada em sua forma final.**

**Prof. CLOVIS R. MALISKA, Ph.D.
ORIENTADOR**

**Prof. FERNANDO CABRAL, Ph.D.
Coordenador do Curso**

BANCA EXAMINADORA:

**Prof. ANTÔNIO FÁBIO CARVALHO DA SILVA, Dr.Eng.
Presidente**

Prof. MARCELO JOSÉ COLAÇO, Dr.

Prof. EDUARDO ALBERTO FANCELLO, D.Sc.

**À minha esposa Gisele,
ao meu filho Gabriel,**

**À minha mãe,
meu pai e irmãos,**

AGRADECIMENTOS

Primeiramente gostaria de agradecer aos meus pais, irmãos e familiares, pelo constante apoio e incentivo durante toda a minha vida acadêmica.

Ao meu orientador, *Professor Clovis R. Maliska*, pelo apoio e orientação recebidos durante a confecção do trabalho.

Aos meus amigos, pelo incentivo durante os últimos meses de estudo.

Aos diretores da empresa onde trabalho, *Engineering Simulation and Scientific Software* (ESSS), por me apoiarem durante todo o processo, permitindo que eu me dedicasse às disciplinas da pós-graduação, e que utilizasse a infra-estrutura da empresa para realizar o trabalho.

A Nader Fateh, Silvia Poles e Sumeet Parashar, da empresa Esteco, que me ajudaram em diversas dúvidas sobre algoritmos de otimização e metamodelos.

Ao meu filho Gabriel, pela saudável distração e entretenimento durante as longas horas de estudo.

E um agradecimento especial à minha esposa, *Gisele Wagenführ Tridapalli*, que além da compreensão e carinho, assumiu nos últimos meses todas as minhas responsabilidades para que eu pudesse me dedicar à confecção do presente manuscrito.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	VII
LISTA DE TABELAS	X
SÍMBOLOGIA	XI
RESUMO	XIII
ABSTRACT	XIV
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Revisão Bibliográfica	4
1.1.1 Modelagem numérica do escoamento no interior do distribuidor	4
1.1.2 Otimização baseada em soluções aproximadas	7
1.1.3 Otimização de distribuidores de Lingotamento contínuo	13
1.2 Considerações gerais	14
1.2.1 Ferramentas computacionais	15
1.3 Organização do presente trabalho	15
2 DISTRIBUIDORES DE LINGOTAMENTO CONTÍNUO	17
2.1 Modelagem física	19
2.1.1 Condições de similaridade	20
2.1.2 Resultados	22
2.2 Modelagem matemática	23
2.3 Caracterização dos distribuidores	25
2.3.1 Volumes Característicos	27
2.3.2 Tempos Característicos	29
2.4 Controladores de Fluxo:	30
2.4.1 Diques e Barragens	30
2.4.2 Tampões	31
2.4.3 Inibidores de Turbulência	31
2.4.4 Projeto dos Controladores de Fluxo	32
2.5 Integridade da Escória	32
2.6 Inclusões	33
3 FORMULAÇÃO NUMÉRICA	35
3.1 Equações de Conservação	36
3.2 Obtenção das equações Aproximadas	38
3.2.1 Método dos Volumes Finitos baseados em Elementos (EbFVM)	38
3.2.2 Funções de Interpolação Espaciais	40
3.2.3 Termos Transientes	44
3.3 Modelos de Turbulência	46
3.3.1 Modelo SST	48

3.3.2 Funções de Parede.....	49
3.3.3 Aproximação de Boussinesq.....	53
3.3.4 Modelos Lagrangeanos.....	54
3.4 CFD aplicado ao distribuidor	55
3.4.1 Geometria e Malha.....	56
3.4.2 Propriedades dos Materiais	57
3.4.3 Condições de Contorno	58
3.4.4 Características Globais	59
3.4.5 Metodologia de Trabalho	60
3.4.6 Comparação com resultados experimentais	61
4 TÉCNICAS DE OTIMIZAÇÃO	62
4.1 Metodologia para estudo de otimização de distribuidores.....	64
4.1.1 Determinação das soluções de alta e baixa-fidelidade	66
4.1.2 Planejamento e Análise de Experimentos Computacionais-I	66
4.1.3 Funções de Correção Global	67
4.1.4 Planejamento e Análise de Experimentos Computacionais-II	67
4.1.5 Representação da resposta de baixa-fidelidade por Meta-Modelos.....	68
4.1.6 Otimização com base no Meta-Modelo.....	68
4.1.7 Avaliação das soluções extraídas da Fronteira de Pareto Virtual.....	68
4.1.8 Análise da Convergência	69
4.1.9 Validação das Soluções com o modelo de alta-fidelidade	69
4.1.10 Acuracidade	69
4.2 Planejamento de Experimentos Computacionais	70
4.3 Algoritmos de Otimização	71
4.3.1 Algoritmos genéticos	72
4.3.2 NSGA-II.....	74
4.4 Meta-Modelagem.....	76
4.4.1 Aproximações por Funções de Base Radial	76
5 RESULTADOS	81
5.1 Definição do Problema de Otimização	81
5.1.1 Variáveis de projeto e funções de restrição	82
5.1.2 Funções Objetivo	83
5.2 Determinação das soluções de alta e baixa-fidelidade	84
5.3 Caso 01-Função de correção global variável	86
5.3.1 Planejamento de Experimentos Computacionais	87
5.3.2 Funções de Correção.....	90
5.3.3 Planejamento de Experimentos (solução de baixa-fidelidade)	90
5.3.4 Solução do problema	91

5.3.5 Análise da Acurácia	93
5.4 Caso 2- Função de Correção Constante	94
5.4.1 Planejamento de Experimentos (solução de baixa-fidelidade)	95
5.4.2 Solução do problema	95
5.4.3 Análise da Acurácia	97
5.5 Comparação entre resultados	99
5.5.1 Redução dos tempos de Processamento	102
6 CONCLUSÕES_	104
6.1 Sugestões para trabalhos futuros	105
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	106
APÊNDICES.....	116
Apêndice 01	117
Apêndice 02	119
Apêndice 03	122
Apêndice 04	124

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1-Esquema representativo de um distribuidor com dois veios (saídas).....	2
Figura 1.2- Criação de meta-modelos por meio de funções polinomiais de segunda ordem (a), quarta ordem (b), e Kriging (c). (extraído de Simpson <i>et al</i> 2002).....	8
Figura 1.3- Ruídos e estimativa de derivadas associadas à resposta numérica de um sistema(a), e cálculo de derivadas obtido com a representação da resposta do sistema por meio de meta-modelos (b). (Adaptado de De Kock 2005).....	8
Figura 2.1 – Representação do pulso de traçador injetado na entrada do domínio(a), e a dispersão do mesmo obtido na saída(b). O início da injeção do traçador corresponde ao início do experimento ($t=0s$).	23
Figura 2.2 – Figura ilustrando uma curva típica de distribuição de tempo de residência para um distribuidor.	27
Figura 2.3. Dispositivos de controladores de fluxo destacados em negrito. (a) Barragens, (b) Diques, (c) Tampões, (d) inibidores de turbulência.....	30
Figura 2.4. Ilustração do padrão de escoamento sem a presença de controladores de fluxo (a) e com a presença de controladores de fluxo (b). (Fonte: Shade 1996).....	31
Figura 3.1- Processo de obtenção dos volumes de controle no método EbFVM e posicionamento dos pontos de integração.	39
Figura 3.2- Determinação do valor da propriedade num ponto de integração para um problema fortemente advectivo.	41
Figura 3.3-Problema utilizado para representar os problemas de oscilação e difusão numérica originados pelas funções de interpolação dos termos advectivos [Patankar 1980].	43
Figura 3.4- Resultados obtidos com as diferentes funções de interpolação nas malhas de 10x10(a) e 100x100(b) elementos.	44
Figura 3.5- Valores da Função de transição F_l para diferentes camadas limite. δ representa a espessura da camada limite. (Fonte: Menter 1992).....	49
Figura 3.6-Perfil de velocidades na camada limite associado ao escoamento turbulento.	50
Figura 3.7 – Comparação entre os valores de coeficiente de atrito (c_f) obtidos com diferentes funções de parede, para diferentes alturas do primeiro nó da malha (y^+).	53
Figura 3.8 – Geometria do distribuidor analisada no presente trabalho.	56
Figura 3.9 – Esquema representativo do modelo computacional e condições de contorno. Vista Frontal (a) e lateral (b).	56
Figura 3.10 – Malha hexaédrica criada para o problema.	57
Figura 3.11- Fluxograma com as etapas desenvolvidas na avaliação do distribuidor.	60

Figura 3.12- Comparação entre resultados experimentais e numéricos com diferentes refinamentos de malha.....	61
Figura 4.1 – Fluxograma com a metodologia proposta para o estudo de otimização de distribuidores.	65
Figura 4.2- Planejamento fatorial completo num domínio de projeto tridimensional.	70
Figura 4.3-Exemplo de decodificação binária.....	72
Figura 4.4-Operação de Cross-over.	73
Figura 4.5- Ilustração do Conceito de dominância de Pareto para um problema com duas funções objetivo a serem maximizadas $F(x)$ e $G(x)$	74
Figura 4.6- Quadrilátero que representa a distância entre uma solução P e as suas soluções vizinhas.	75
Figura 4.7 –Exemplo utilizado para representar a construção de meta-modelos.	79
Figura 4.8- Aproximações por Funções de base Radial Multi-quadráticas (a), Gaussianas (b), e as funções $h_p(x - x_p)$ associadas às mesmas respectivamente nas figuras (c) e (d).	80
Figura 5.1- Parâmetros geométricos selecionados para a caracterização do inibidor de turbulência.....	82
Figura 5.2- Convergência das funções objetivo com o refino de malha.....	84
Figura 5.3- Erro no cálculo das funções objetivos em relação à solução da malha de maior refino. (V_M =Volume Morto, σ =Variância da DTR e U_{MAX} =máxima velocidade na escória).....	85
Figura 5.4-Matriz de correlação entre as inclusões removidas para diferentes tamanhos (a), e valores de remoção das inclusões para as diferentes configurações analisadas (b).	88
Figura 5.5- Valores normalizados de variância e volume morto para as diferentes configurações (a). Curvas DTR para os valores mínimos de variância e Volume Morto observados (b).	89
Figura 5.6- Valores normalizados para o número de partículas coletadas (a), variância da DTR (b) e velocidade máxima na escória (c) obtidos com o modelo de alta-fidelidade (cinza escuro) e baixa fidelidade (cinza claro).	89
Figura 5.7-Convergência do processo no modelo de baixa fidelidade. Soluções reais à esquerda, virtuais à direita.	92
Figura 5.8-Convergência do processo na segunda iteração do ciclo de otimização. Soluções reais à esquerda, virtuais à direita.	94
Figura 5.9- Convergência do processo no modelo de baixa fidelidade. Soluções reais à esquerda, virtuais à direita.	96

Figura 5.10- Convergência do processo na segunda iteração do ciclo de otimização. Soluções reais à esquerda, virtuais à direita.....	98
Figura 5.11- Configurações encontradas pelas duas abordagens e configuração inicial.	99
Figura 5.12- Vistas laterais e frontais do inibidor de turbulência na configuração original (a) e resultados otimizados encontrados com a abordagem 1(b) e 2(c).	101
Figura 5.13 – Curvas DTR para a configuração original e melhor configuração encontrada.	102

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Propriedades físicas da água e do aço. Fonte Mazumdar (1999).	20
Tabela 2.2 – Tamanho máximo de inclusões exigidas para diferentes produtos. Fonte Zhang e Thomas (2003).	33
Tabela 3.1-Propriedades dos materiais utilizados no presente trabalho. O símbolo X indica que a propriedade não está sendo considerada no modelo.	57
Tabela 4.1- Alternativas para estudos de otimização de distribuidores	63
Tabela 4.2 – Diferentes modelos para funções de base radial.	78
Tabela 5.1- Comparação de resultados para ponto ótimo de operação.	93
Tabela 5.2- Comparação de resultados para ponto ótimo de operação	97
Tabela 5.3-Comparação entre os resultados obtidos e a configuração inicial.	99
Tabela 5.4-Detalhes das configurações e resultados encontrados.	100
Tabela 5.5-Análise de desempenho da metodologia proposta.	102

SÍMBOLOGIA

Alfabeto Latino:

c	Valor de concentração de traçador	[kg/m ³]
c_p	Calor específico à pressão constante	[J/ (kg.K)]
C	Valor normalizado para a concentração de traçador	[1]
C_r	Valor de referência para a concentração de traçador	[kg/m ³]
D_ϕ	Difusividade de uma variável ϕ	[m ² /s]
e	Energia interna	[m ² / s ²]
\mathbf{F}_{VC}	Força atuando sobre volume de controle	[kg m/ s ²]
F_1	Função de migração do modelo de turbulência SST	[1]
\mathbf{g}	Vetor gravidade	[m/ s ²]
h	Entalpia	[m ² / s ²]
k	Condutividade térmica	[W/(m.K)]
k_t	Condutividade térmica turbulenta	[W/(m.K)]
K	Energia cinética	[m ² /s ²]
\tilde{K}	Energia cinética turbulenta	[m ² /s ²]
\dot{m}	Fluxo de massa	[kg/s]
m_t	Massa de traçador injetada no domínio	[kg]
\mathbf{n}	Vetor representando a normal da face de um volume de controle	[1]
p	Pressão	[kg/ s ² m]
p'	Pressão modificada no escoamento turbulento	[kg/ s ² m]
Pr_t	Número de Prandtl turbulento	[1]
\dot{Q}	Calor trocado pelo volume de controle nas suas faces	[W]
Q_D	Vazão volumétrica do distribuidor	[m ³ /s]
S_E	Termo fonte: equação de conservação de energia	[kg/m s ³]
S_Q	Termo fonte: equação de conservação de quantidade de movimento	[kg/m ² s ²]
t	Tempo	[s]
T	Temperatura	[K]
\dot{W}	Trabalho exercido pelo volume de controle	[W]
$\tilde{\mathbf{u}}$	Flutuação turbulenta de velocidade	[m/s]
u_τ	Velocidade de fricção empregada nas funções de parede	[m/s]

\mathbf{U}	Vetor velocidade	[m/s]
V	Volume	[m ³]
V_D	Volume ocupado pelo metal no interior do distribuidor	[m ³]
V_M	Fração de volume morto	[1]
y^+	Distância adimensional do primeiro nó da malha em relação à parede	[1]

Alfabeto Grego:

β	Coeficiente de expansão volumétrica do fluido	[1 / K]
ϕ	Variável genérica	[1]
λ	Fator de escala	[1]
δ	Delta de Kronecker	[1]
ε	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta	[m ² / s ³]
μ	Viscosidade molecular	[kg/(m.s)]
μ_e	Viscosidade efetiva	[kg/(m.s)]
μ_t	Viscosidade turbulenta	[kg/(m.s)]
ν	Viscosidade cinemática	[m ² /s]
θ	Tempo adimensional	[1]
θ_{\min}	Tempo mínimo de residência	[1]
ρ	Densidade	[kg/m ³]
σ^2	Variância da curva DTR	[1]
τ	Tensor de tensões atuando sobre o fluido	[kg/ s ² m]
τ^*	Tensor de tensões viscosas atuando sobre o fluido	[kg/ s ² m]
T	Tempo teórico de residência do distribuidor	[s]
ω	Frequência Turbulenta	[s ²]

Abreviaturas

CAE	Engenharia Auxiliada por Computador
CFD	Mecânica dos Fluidos Computacional
DTR	Distribuição dos Tempos de Residência
DNS	Simulação Numérica Direta
PIV	Velocimetria por Imagem de Partícula
RANS	Equações Médias de Navier-Stokes
SST	Modelo de Turbulência <i>Shear Stress Transport</i>

RESUMO

O presente trabalho tem como objetivo apresentar uma metodologia genérica que possibilite a redução dos custos computacionais envolvidos no estudo de otimização de projetos de equipamentos que utilizam soluções numéricas de escoamento de fluidos, ou seja, mecânica dos fluidos computacional. A aplicação da metodologia é feita para a otimização de distribuidores de aço em lingotamento contínuo.

A metodologia apresentada neste trabalho emprega o conceito de análises multi-fidelidade para permitir que o estudo de otimização seja realizado em uma malha suficientemente grosseira que, além de acelerar o processo, possibilita a utilização de recursos computacionais de hardware menos avançados, podendo estender o processo a empresas de pequeno e médio porte.

Além disso, metamodelos adaptativos, baseados em aproximações por Funções de Base Radial são utilizados para representar a resposta do sistema, reduzindo o número de análises fluido-dinâmicas necessárias para convergência do problema.

Reduções de até 90% do tempo total de processamento são observadas quando a metodologia é aplicada no estudo de otimização de um inibidor de turbulência posicionado no interior do distribuidor.

ABSTRACT

This work presents a general methodology to improve the computational efficiency involved in the optimization of equipments which employs the numerical solution of fluid flow problems. As test problem, the methodology is applied to optimize continuous casting tundishes.

The methodology applies the concept of multi-fidelity analyses, allowing the optimization study to be conducted on a very coarse mesh, which not only speeds up the process, but also allows it to be conducted on less advanced computer hardware. This allows small and medium companies to use the methodology. In addition, adaptative metamodels based on Radial Basis Function approximations are used to represent the system response, reducing the number of numerical simulations needed to obtain convergence.

Computational savings of up to 90% are observed when the methodology is applied on an optimization study involving a turbulence inhibitor pad positioned inside the tundish.

CAPÍTULO 01

INTRODUÇÃO

O processo de lingotamento contínuo foi concebido por Henry Bessemer em 1858, porém a tecnologia só passou a ser utilizada industrialmente a partir da década de 1960, depois que as primeiras dificuldades encontradas na implementação do processo foram superadas [Thomas *et al* 2001].

Apesar da sua história recente, o aumento de produção e a redução dos custos de operação proporcionados pelo lingotamento contínuo contribuíram para que a tecnologia fosse adotada como principal processo de produção de aço, alumínio e outros metais. Em 2001, mais de 500 milhões de toneladas de aço, 20 milhões de toneladas de alumínio e 1 milhão de toneladas de cobre, níquel e outros metais foram produzidos pelo processo de lingotamento contínuo, o que representa cerca de 90% da produção mundial [Thomas 2001]. Dados mais recentes indicam que a produção mundial de aço bruto em 2006 ultrapassou 1.2 bilhões de toneladas [IISI 2007].

No Brasil, a produção de aço em 2006 foi de aproximadamente 31 milhões de toneladas, das quais 94% foram geradas por lingotamento contínuo [IBS 2007]. O Instituto Brasileiro de Siderurgia afirma ainda que a capacidade de produção nacional deve atingir 50 milhões de toneladas/ano até 2012 [IBS 2007], demonstrando a importância do setor para o desenvolvimento do país.

Embora o lingotamento contínuo apresente inúmeras vantagens em relação ao método tradicional, muitas etapas são comuns às duas tecnologias. Somente nas etapas imediatamente anteriores à solidificação do metal é que os processos passam a divergir. Enquanto no processo tradicional o metal líquido é despejado em um molde fechado, no lingotamento contínuo ele é direcionado para um molde vazado, fornecendo um fluxo ininterrupto de metal às esteiras de rolagem.

Para ilustrar este processo, considere a Figura 1.1, na qual os últimos componentes utilizados no processo de lingotamento contínuo são ilustrados. A panela, que armazena o metal líquido na sua composição química final¹, tem o seu conteúdo despejado no distribuidor através da válvula longa. Dentro do distribuidor o metal avança lentamente até as saídas, podendo levar alguns minutos para percorrer o percurso.

¹ No caso do aço, o ferro-gusa proveniente do alto-forno deve ter o seu teor de carbono e oxigênio controlados. Essas operações são geralmente realizadas nas etapas anteriores ao armazenamento na panela. A única exceção é a adição de ligas metálicas, que também pode ser realizada no distribuidor [Mazumdar e Guthrie 1999].

Nas saídas, ou veios, o metal atravessa a válvula submersa para entrar na região identificada como molde, que neste caso consiste numa peça vazada.

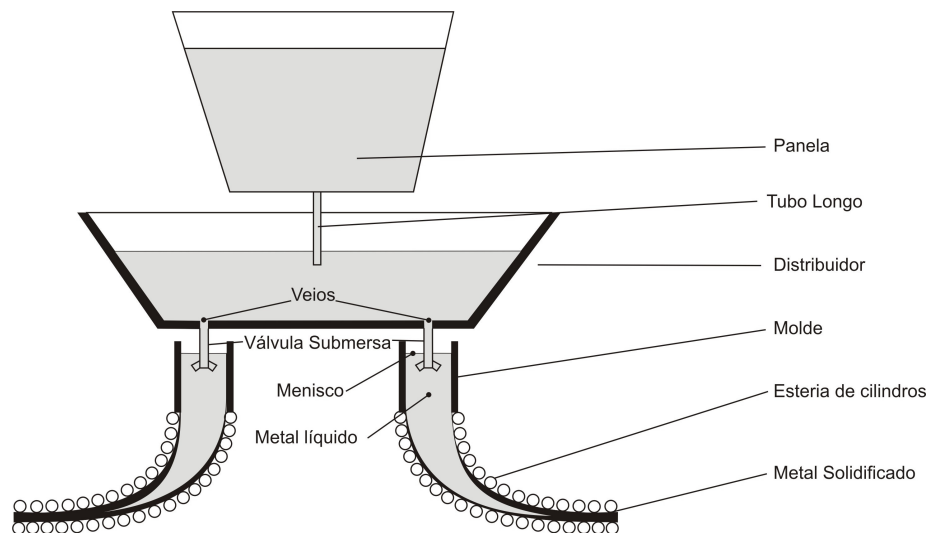


Figura 1.1-Esquema representativo de um distribuidor com dois veios (saídas)

Na parte superior do molde, o banho de metal líquido é protegido da atmosfera por uma fina camada de escória, e pela adição de material fluxante, que irá contribuir para o deslizamento entre o metal e as paredes do molde. As paredes do molde são resfriadas, para que o processo de solidificação do metal seja iniciado, e apresentam movimentos oscilatórios, para que o metal recém solidificado não adira às mesmas. Ao sair do molde o metal já apresenta uma pequena espessura solidificada, enquanto o seu núcleo ainda permanece no estado líquido. O metal é continuamente resfriado enquanto avança às esteiras de rolagem, sendo que a sua seção transversal deve estar completamente solidificada antes que as primeiras operações de conformação sejam realizadas.

É importante destacar que o processo ilustrado acima representa apenas as últimas etapas da produção de aço. Inúmeras operações são realizadas com o metal desde o seu ingresso na forma de minério de ferro no topo do alto forno até a solidificação apresentada no exemplo. Algumas destas operações dão origem a partículas indesejadas, que acompanham o fluxo do metal ao longo de todo o processo de lingotamento. Estas impurezas, também conhecidas como inclusões não metálicas, atuam como concentradores de tensão no metal solidificado estando, portanto, diretamente relacionadas com problemas de redução da tensão de ruptura, formação de trincas e redução da resistência à fadiga do material [Zhang e Thomas 2003].

Além da alteração das propriedades mecânicas, as inclusões também estão relacionadas com problemas de acabamento superficial do material, tornando-se fatores determinantes na produção de laminados, como aqueles produzidos para a indústria automotiva [Sinha e Sahai 1993].

O nível de impurezas torna-se assim um importante critério para avaliação da qualidade do metal produzido, fazendo com que um grande esforço seja investido na pesquisa de projetos eficientes, capazes de remover grande parte das inclusões, atendendo às especificações cada vez mais restritas do mercado [Mazumdar e Guthrie 1999].

Atualmente o principal método utilizado para remoção destas inclusões consiste na flotação das mesmas durante o período de permanência no interior do distribuidor. As partículas flutam até a superfície do banho para, em seguida, serem coletadas pela escória [Sinha e Sahai 1993]. A eficiência do distribuidor nesta atividade depende fortemente do padrão do escoamento no seu interior² e, assim, as simulações numéricas tornam-se importantes aliadas no projeto destes equipamentos, fornecendo indicativos de performance sem a necessidade de construção de protótipos ou modelos experimentais.

No entanto o projeto de distribuidores envolve a especificação de um grande número de parâmetros, e uma única análise numérica dificilmente irá indicar os valores que estas variáveis devem assumir para otimizar a eficiência do equipamento. A avaliação de todas as possíveis combinações seria inviável, porém a necessidade de aperfeiçoamento constante destes equipamentos exige que alguma técnica seja empregada na busca por um projeto eficiente. A possibilidade de calcular a eficiência do distribuidor numericamente faz com que os algoritmos de otimização tornem-se ferramentas adequadas para garantir o aperfeiçoamento destes equipamentos.

Porém o elevado custo computacional das análises fluido-dinâmicas, associado ao processo iterativo dos algoritmos de otimização, acaba por inviabilizar a aplicação destas ferramentas, pois o estudo seria pouco eficiente, com um tempo de resposta excessivamente elevado. Como consequência, o projeto de distribuidores acaba recorrendo a um pequeno número de análises computacionais, fazendo com que poucas soluções sejam avaliadas, enquanto inúmeras outras poderiam ser investigadas na procura por um ponto ótimo de operação.

O objetivo do presente trabalho é introduzir uma metodologia que permita a redução do custo computacional envolvido nas análises fluido-dinâmicas de distribuidores, permitindo a aplicação destas análises em estudos de otimização. A metodologia emprega o conceito de soluções aproximadas³, comumente empregado no setor aeroespacial, para permitir que o estudo de otimização seja realizado em uma malha suficientemente grosseira, que além de acelerar o estudo, possibilite a utilização de recursos computacionais menos avançados.

Além disso, a metodologia utiliza ainda extrapolações matemáticas para avaliar a eficiência do distribuidor nas regiões onde a mesma ainda não foi calculada, o que reduz

² A relação de dependência entre o processo de remoção de inclusões e o padrão de escoamento no distribuidor será apresentada em detalhes no capítulo 02.

³ Conhecidas como Surrogate Based Optimization (SOB).

consideravelmente o número de análises fluido-dinâmicas necessárias para encontrar o ponto ótimo de operação do equipamento. A metodologia pode ser estendida para projetos de outros equipamentos que usam soluções numéricas de escoamento de fluidos como base para a otimização.

1.1 Revisão Bibliográfica

Nesta seção será apresentado um breve panorama do estado da arte das técnicas numéricas utilizadas no presente estudo.

É importante destacar que o volume de trabalhos envolvendo simultaneamente otimização e análises fluido-dinâmicas de distribuidores é pequeno quando comparado ao número de publicações em cada uma das áreas separadamente. Por este motivo, a revisão bibliográfica é dividida em três partes. A primeira parte aborda a modelagem numérica do escoamento no interior do distribuidor, enquanto a segunda se dedica às técnicas de otimização baseadas em soluções aproximadas, e a terceira aos estudos de otimização de distribuidores.

1.1.1 Modelagem numérica do escoamento no interior do distribuidor

As primeiras análises numéricas do escoamento no interior do distribuidor utilizavam modelos bidimensionais, como o estudo desenvolvido por Debroy e Sychterz (1985). Análises tridimensionais realizadas por He e Sahai (1987) em geometrias semelhantes às consideradas por Debroy e Sychterz demonstraram, entretanto, que o escoamento no interior do Tundish tem efeitos tridimensionais importantes, que não haviam sido detectados nas análises anteriores. Os modelos tridimensionais passaram, assim, a assumir um papel importante na análise de distribuidores, como destacado por Mazumdar e Guthrie (1999).

Além de tridimensional, o escoamento no distribuidor é intrinsecamente transiente, com alterações na altura do banho de metal durante as trocas de panela. No entanto a maioria dos autores considera que estes eventos representam uma pequena fração de tempo em relação à operação do distribuidor e, por isso, utilizam alturas constantes para modelar o escoamento. A utilização de alturas constantes para descrever o banho de metal líquido pode ser encontrada nos trabalhos de He e Sahai (1987), Craig *et al* (2001), Kumar, Korla e Mazumdar (2004), Daoud (2006), entre vários outros. Na prática a altura constante do banho consiste em modelar a camada de escória como uma parede sem atrito, desconsiderando o escoamento multi-fásico caracterizado pela interação entre o escoamento, a escória e atmosfera. Esta simplificação também é utilizada pelos autores mencionados no parágrafo anterior.

O escoamento multi-fásico (metal-escória-ar) é considerado por Pardeshi *et al* (2004), porém o estudo utiliza análises bidimensionais, em função da complexidade adicionada pelo modelo.

Outro detalhe importante consiste na caracterização da turbulência no modelo numérico. Mazumdar e Guthrie (1999) destacam que o escoamento no interior do distribuidor apresenta regiões com grandes variações de velocidade, o que deve ser levado em conta na escolha do modelo de turbulência. Segundo os autores, apesar da larga utilização dos modelos baseados na dissipação da energia turbulenta ($K-\epsilon$), os mesmos apresentam restrições para modelagem da camada limite em escoamentos de baixa velocidade, como encontrado em algumas regiões do distribuidor.

A deficiência do modelo $K-\epsilon$ na modelagem do escoamento no distribuidor é destacada por Camplin *et al* (1990), enquanto Menter (1994) e Vieser, Esch e Menter (2002) destacam o mesmo problema para outras aplicações de mecânica dos fluidos computacional. Daoud (2006) apesar de utilizar o modelo $K-\epsilon$ também sugere a utilização de modelos voltados para escoamentos à baixa velocidade.

Segundo Mazumdar e Guthrie (1999), uma alternativa ao modelo $K-\epsilon$ seria aplicar um modelo com formulações específicas para camada limite de escoamentos à baixa velocidade (ou baixo Reynolds), como algumas próprias variações do modelo $K-\epsilon$. No entanto as formulações para baixo Reynolds acabam exigindo um refino excessivo da malha próximo à parede, como destacado pelos próprios autores, e por Vieser, Esch e Menter (2002).

Para contornar estas dificuldades, o presente estudo utiliza uma modelagem híbrida proposta por Menter (1994). Este modelo, conhecido como SST, apresenta consistência física para o escoamento próximo à parede para qualquer nível de velocidade, eliminando restrições sobre o refino de malha nesta região. O modelo torna-se, portanto, adequado para o escoamento no interior do distribuidor, assim como para as soluções baseadas em malhas grosseiras. O modelo é apresentado com mais detalhes na seção 3.3.

Em relação à contribuição da convecção natural para o padrão do escoamento, a utilização da aproximação de Boussinesq foi utilizada em todos os trabalhos encontrados, dentre os quais: Craig *et al* (2001), Jha e Dash (2002), Ramos Banderas *et al* (2003), De Kock (2005), Daoud (2006), entre outros.

Em relação à estimativa da eficiência do distribuidor na remoção de inclusões, Mazumdar e Guthrie (1999) destacam que duas metodologias podem ser empregadas:

- A avaliação da curva de distribuição dos tempos de residência do distribuidor (DTR);
- Análise da trajetória de inclusões.

As curvas DTR são obtidas por meio do monitoramento da concentração de um traçador na saída do domínio, após a injeção do mesmo na forma de um pulso na entrada

do distribuidor. Esta metodologia é empregada por He e Sahai (1990), Yeh e Hwang (1994), Fan *et al* [2002], Jha, Dash e Kumar (2001), Barbosa, Filho e Tavares (2005), entre outros.

Como destacado por Sahai e Emi (1996), as curvas de DTR podem ser facilmente obtidas em experimentos em laboratório, permitindo que a metodologia numérica seja confrontada com resultados experimentais, o que atribui grande confiabilidade a estes resultados. Segundo Daoud (2006), a principal desvantagem da metodologia reside no alto custo computacional associado às análises transientes necessárias para simular o comportamento do traçador no domínio.

Daoud sugere que as curvas DTR sejam obtidas por intermédio de modelos lagrangeanos, baseados em soluções estacionárias. Neste caso um número elevado de partículas seria injetado no domínio, e o tempo de residência associado a cada partícula permitiria a reconstrução da DTR. Esta metodologia também é aplicada por Schwarze *et al*. (2001). Apesar de promissora, ela ainda requer validações experimentais mais extensivas e, por isso, não foi adotada no presente trabalho.

O segundo critério apresentado por Mazundar e Guthrie (1999) para avaliação da eficiência do distribuidor na remoção de inclusões consiste na avaliação da trajetória destas partículas no interior do equipamento. Sinha e Sahai (1993), Tozawa *et al* (1999) e Ishi *et al* (2001), comentam que a análise da trajetória de inclusões no interior do distribuidor deve levar em conta fenômenos de colisão e aglomeração das partículas, assim como a possível adesão das mesmas às paredes do distribuidor.

Embora fisicamente plausíveis estes fenômenos aumentam consideravelmente a complexidade dos modelos numéricos, enquanto apresentam poucas validações com resultados experimentais. Por este motivo, autores como De Kock (2005) e Daoud (2006) representam a trajetória de partículas com diâmetros fixos, sem considerar a colisão e coalescência das mesmas. Esta abordagem também é adotada no presente trabalho.

Segundo Sinha e Sahai (1993), Ishi *et al* (2002) e Ramos-banderas *et al* (2002) o diâmetro das inclusões é relativamente pequeno e, por isso, a influência das mesmas no escoamento pode ser desprezada.

Seguindo a modelagem realizada por Sinha e Sahai (1993), De Kock(2005) e Daoud(2006), a remoção das inclusões na escória é considerada como uma absorção ideal, isto é, todas as partículas entrando em contato com a escória são capturadas pela mesma.

Resumo:

De acordo com o apresentado acima, a modelagem do distribuidor adotada no presente trabalho utiliza modelos tridimensionais, considerando o escoamento em regime permanente e monofásico, com a camada de escória sendo modelada como uma parede sem atrito.

O modelo de turbulência empregado é o SST proposto por Menter (1994), por permitir a modelagem adequada tanto em regiões de baixa quanto alta velocidade, com formulações de parede consistentes para diferentes refinamentos de malha na direção normal à parede.

A eficiência do equipamento é calculada com base na curva de DTR, obtida por meio da análise transiente da dispersão do traçador injetado no domínio, e pela análise do número de inclusões coletadas na escória do problema.

Outros detalhes envolvendo o modelo numérico do distribuidor de lingotamento contínuo, como funções de interpolação, funções de parede e condições de contorno serão apresentados no capítulo 03.

1.1.2 Otimização baseada em soluções aproximadas

Análises numéricas de problemas reais de engenharia dependem de ferramentas complexas e computacionalmente onerosas para fornecer uma resposta acurada, de alta-fidelidade, ao problema que se pretende representar.

Essas características acabam dificultando a aplicação destas ferramentas de CAE em estudos de otimização e, para contornar estas dificuldades, técnicas de otimização baseadas em soluções aproximadas⁴ são comumente utilizadas, como, por exemplo, nos trabalhos de Alexandrov *et al* (2001), Mujundar *et al* (2003), Forrester, Bressloff e Keane (2006) e Eldred e Dunlavy (2006).

Segundo Alexandrov *et al* (2001), duas classes de soluções aproximadas se destacam nesta abordagem: as técnicas baseadas em meta-modelos, e àquelas baseadas em multi-fidelidade, apresentadas a seguir.

Meta-Modelos:

Na meta-modelagem, a ferramenta de alta-fidelidade é substituída por uma representação matemática da resposta do sistema sendo analisado. Esta representação é gerada a partir da regressão ou interpolação de um conjunto de resultados de alta-fidelidade.

Dentre as técnicas utilizadas para construção dos meta-modelos podem ser mencionadas as regressões polinomiais, Kriging, Redes Neurais Artificiais, Funções de base Radial, entre outras. A figura 1.2 ilustra a criação de diferentes meta-modelos para um mesmo conjunto de dados de entrada.

Segundo Simpson *et al* (1998) e Giunta (1997 e 2002), a utilização de meta-modelos em estudos de otimização apresenta grandes vantagens em relação à utilização dos modelos de alta-fidelidade. A principal, já destacada, consiste na redução do custo

⁴ Na língua inglesa estas técnicas são conhecidas como SOB, ou *Surrogate Based Optimization* [Eldred e Dunlavy (2006)].

computacional, uma vez em que as custosas análises de alta-fidelidade são substituídas por modelos matemáticos de rápida avaliação.

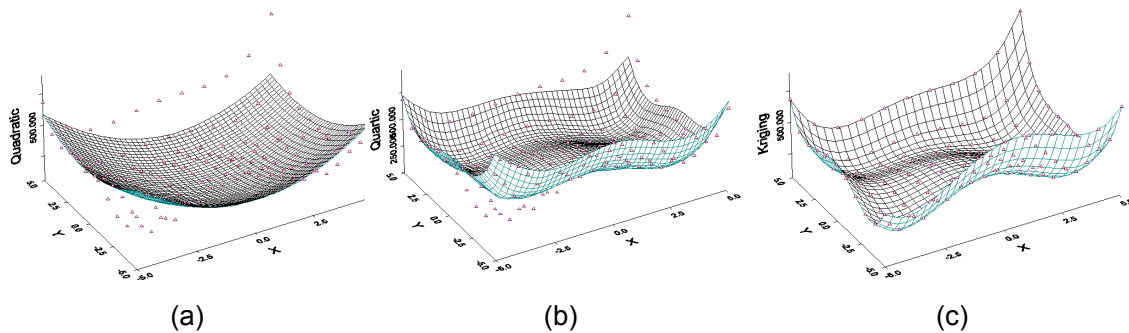


Figura 1.2- Criação de meta-modelos por meio de funções polinomiais de segunda ordem (a), quarta ordem (b), e Kriging (c). (extraído de Simpson *et al* 2002).

Outra vantagem destacada pelos autores, e por De Kock (2005), é que os meta-modelos podem suavizar possíveis ruídos numéricos observados nas respostas das ferramentas de alta-fidelidade, o que pode ser particularmente útil para os algoritmos de otimização baseados em gradientes, já que as informações de derivadas obtidas no modelo de alta-fidelidade poderiam ser pouco acuradas, ou inexistentes.

A Figura 1.3 (a) ilustra a resposta de um sistema contaminado por ruídos numéricos⁵ e a dificuldade de se calcular uma derivada representativa do comportamento global da função. A Figura 1.3 (b) ilustra uma possível aproximação por meta-modelos que, ao representar comportamentos globais da função, acabam facilitando o cálculo das derivadas.

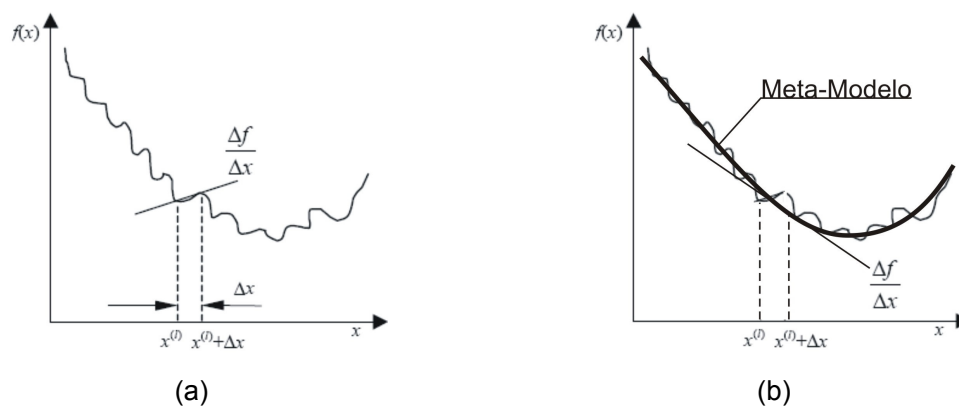


Figura 1.3- Ruídos e estimativa de derivadas associadas à resposta numérica de um sistema(a), e cálculo de derivadas obtido com a representação da resposta do sistema por meio de meta-modelos (b). (Adaptado de De Kock 2005).

⁵ Representações reais de ruídos numéricos e suavizações apresentadas pela utilização de meta-modelos podem ser encontradas em Giunta (1997).

Deve-se destacar, entretanto, que a representação adequada do problema por um meta-modelo está diretamente relacionada com o número de dados utilizados para a sua construção, e com a natureza do problema sendo resolvido [Simpson *et al* 2002]. Em especial, nos problemas envolvendo equações não lineares, a resposta do sistema pode apresentar comportamentos distintos em diferentes regiões do domínio, dificultando a utilização de meta-modelos globais, isto é, que atuem sobre toda a extensão do domínio de projeto. Os problemas envolvidos na utilização de meta-modelos globais são também destacados por Viana *et al* (2007), enquanto Colaço, Dulikravich e Sahoo (2007) fazem uma extensa comparação entre duas metodologias para construção de meta-modelos em funções altamente não lineares.

Por este motivo, Eldred, Giunta e Collis (2004) destacam que os estudos de otimização baseados neste tipo de aproximação devem ser adaptativos, isto é, os modelos devem ser atualizados a partir de novas soluções de alta-fidelidade à medida que o estudo avança. Zang (1999) destaca, todavia, que este processo adaptativo pode acarretar inúmeras chamadas ao modelo de alta-fidelidade, encarecendo demasiadamente o estudo de otimização.

O estudo de otimização de distribuidores de lingotamento contínuo desenvolvido por De Kock (2005) utiliza técnicas de aproximações adaptativas, e o grande número de chamadas ao modelo de alta fidelidade é destacado pelo autor.

Multi-fidelidade:

Para garantir uma melhor representação do problema e ao mesmo tempo reduzir os custos computacionais envolvidos nas análises de alta-fidelidade, as aproximações baseadas no conceito de multi-fidelidade são utilizadas [Alexandrov *et al* 2001], [Eldred, Giunta e Collis 2004].

Neste caso, a solução de alta-fidelidade do problema é substituída por um modelo numérico de menor custo computacional, com uma resposta menos acurada, mas que ainda procura representar a física do problema sendo analisado. Alexandrov *et al* (2001), Eldred, Giunta e Collis (2004) e Robinson *et al* (2006), descrevem que os modelos de baixa fidelidade podem envolver uma representação física simplificada do problema original, soluções com critérios de convergência menos rígidos, utilização de malhas com diferentes níveis de refino, entre outros.

A utilização de malhas grosseiras como modelo de baixa fidelidade é empregada por Nash (2000), Lewis e Nash (2001) e Alexandrov *et al* (2001). Os dois primeiros trabalhos fazem uso de refinamentos adaptativos, aumentando o refino da malha à medida que se aproximam da região ótima de operação. Já Alexandrov *et al* (2001) aplicam malhas grosseiras para estimar o cálculo local de derivadas para algoritmos de otimização baseados em gradientes.

Segundo Alexandrov *et al* (2001) e Eldred, Giunta e Collis (2004), a convergência dos modelos de baixa fidelidade para os valores ótimos do modelo de alta fidelidade pode ser comprovada. A única exigência é que o modelo de baixa fidelidade seja consistente em primeira ordem com o modelo de alta fidelidade, isto é, que apresentem igualdade na função que se deseja maximizar e nas suas derivadas nos pontos onde as funções estão sendo avaliadas (localmente).

Para que a condição de consistência em primeira ordem seja respeitada entre a resposta do modelo de baixa fidelidade em $x = x_k$, representada por $\tilde{f}(x_k)$, e a resposta de alta fidelidade, $f(x_k)$, é necessário que:

$$\tilde{f}(x_k) = f(x_k) \quad (1.1)$$

$$\nabla \tilde{f}(x_k) = \nabla f(x_k) \quad (1.2)$$

nas quais $\tilde{f}(x_k)$ representa a resposta do modelo de baixa fidelidade em $x = x_k$, e $f(x_k)$ a resposta de alta fidelidade.

Os autores afirmam que a igualdade representada pela equação 1.1 pode ser obtida a partir de correções aditivas, $A(x)$, ou multiplicativas $B(x)$, aplicadas sobre a resposta original do sistema de baixa fidelidade, $f_{LO}(x)$, representada abaixo:

$$A(x) = f(x) - f_{LO}(x) \quad (1.3)$$

$$B(x) = \frac{f(x)}{f_{LO}(x)} \quad (1.4)$$

de maneira que a resposta corrigida, $\tilde{f}(x)$, pode assumir uma das duas formas a seguir:

$$\tilde{f}(x) = B f_{LO}(x) \quad (1.5)$$

$$\tilde{f}(x) = A(x) + f_{LO}(x) \quad (1.6)$$

No trabalho de Eldred, Giunta e Collis (2004) as funções de correção aditivas se mostraram mais eficientes do que as multiplicativas, e por isso são adotadas no presente trabalho.

Os autores indicam ainda que as funções de correção podem ser modeladas:

- Localmente, com a avaliação da diferença entre as soluções de alta e baixa-fidelidade em um ponto próximo da região onde o problema está sendo analisado;
- Globalmente. Neste caso, a função de correção é representada por um meta-modelo que indica a diferença entre as soluções de alta e baixa-fidelidade ao longo de todo o domínio considerado.

É importante perceber que as funções de correção acima satisfazem apenas uma parte da consistência de primeira ordem, que é a igualdade representada pela equação 1.1. Para satisfazer a segunda condição, ou seja, a igualdade de derivadas, Alexandrov *et al* (2001) e Eldred, Giunta e Collis (2004) sugerem a utilização de algoritmos de otimização baseados em regiões de confiança.

Estes algoritmos calculam derivadas parciais aproximadas para determinar a direção do gradiente da função que se deseja maximizar. A derivada é calculada de maneira discreta, utilizando as soluções do modelo de baixa fidelidade em posições distantes de Δx do ponto atual. Com base nas derivadas parciais, o algoritmo sugere uma nova configuração, que deve, em seguida, ser avaliada pela solução de alta fidelidade. Se a solução de alta fidelidade for melhor do que a anterior, o processo avança. Caso contrário, a região de confiança Δx é reduzida e o processo inicia novamente. Desta maneira a consistência de primeira ordem é verificada localmente.

Apesar de apresentarem a convergência comprovada matematicamente, a dependência destes algoritmos no cálculo de derivadas traz três problemas em potencial:

- As respostas dos modelos de alta e baixa fidelidade podem apresentar ruídos, dificultando o cálculo das derivadas, Eldred, Giunta e Collis (2004).
- As chamadas freqüentes ao modelo de alta fidelidade podem encarecer o estudo, tornando-o pouco eficiente, Zang (1999).
- Os algoritmos podem convergir para pontos de máximo ou mínimo local, isto é, pontos de derivada nula, mas que não representam o valor máximo/mínimo global da função no domínio, Choi *et al* (2004).

A utilização de algoritmos de otimização independentes das informações de gradientes traria, portanto, grandes vantagens às análises multi-fidelidade. Primeiramente, por usufruírem apenas dos valores das funções e não dos de suas derivadas, estes algoritmos exigiriam apenas a consistência de ordem zero entre os modelos de alta e baixa-fidelidade, isto é, que apenas a equação 1.1 fosse observada localmente.

Os algoritmos evolucionários, e em especial os algoritmos genéticos, constituem uma importante classe de algoritmos que independem das informações de gradientes das funções de desempenho do problema. Embora estes algoritmos não apresentem convergência comprovada matematicamente, estudos de otimização baseadas em algoritmos genéticos têm se mostrado eficientes em uma larga gama de problemas de engenharia, como observado nos trabalhos de Choi *et al* (2004) Yamamoto e Inoue (1995), Parashar e Fateh (2007) e Viana *et al* (2007).

Uma desvantagem associada a estes métodos, entretanto, é que exigem um grande número de iterações para determinar as regiões ótimas de operação. Esse elevado número de iterações pode encarecer o estudo de otimização, mesmo com a utilização de modelos de baixa fidelidade, isto é, malhas grosseiras.

Para contornar esta dificuldade, meta-modelos adaptativos podem ser utilizados para modelar a resposta do sistema de baixa-fidelidade. Assim, o grande número de iterações associados aos algoritmos genéticos seriam realizadas diretamente no meta-modelo, e não nas análises de baixa-fidelidade, reduzindo consideravelmente o tempo de processamento do estudo.

A utilização de meta-modelos para acelerar a convergência de estudos de otimização envolvendo algoritmos genéticos pode ser encontrada nos trabalhos de Chung, Choi e Alonso (2003), Parashar e Fateh (2007), entre outros.

Em relação à consistência de ordem zero exigida pelos algoritmos de otimização independentes das informações de gradientes, Eldred, Giunta e Collis (2004) indicam que a mesma pode ser obtida com auxílio de funções globais de correção, isto é, que utilizam meta-modelos para representar o valor da função de correção ao longo do domínio. A grande vantagem das funções de correção globais é que elas são construídas com base num número finito de análises de alta-fidelidade, evitando as chamadas freqüentes a estas análises.

Eldred, Giunta e Collis (2004) e Viana *et al* (2007) comentam ainda que as funções de correção tendem a apresentar um comportamento suave ao longo do domínio de projeto, pois relacionam soluções homólogas (baixa e alta-fidelidade) do mesmo problema. Assim a utilização de meta-modelos para representar as funções de correção apresenta menos chances de não capturar comportamentos locais da função..

Resumo:

Soluções aproximadas são utilizadas para reduzir os custos computacionais observados em estudos de otimização envolvendo ferramentas computacionais complexas, como as utilizadas em análises numéricas de problemas fluido-dinâmicos.

Duas classes de aproximação se destacam nestes estudos: a utilização de meta-modelos e as análises multi-fidelidade. Os meta-modelos correspondem a aproximações matemáticas da resposta do problema sendo analisado, enquanto as análises multi-fidelidade empregam modelos físicos/numéricos simplificados.

A aplicação eficiente de meta-modelos depende do número de dados utilizados para a sua construção e da natureza do problema sendo analisado, podendo trazer vantagens como a redução do tempo de processamento das análises, assim como a suavização de possíveis ruídos numéricos associados à ferramenta de alta-fidelidade. A desvantagem é que as expressões matemáticas simplificadas podem não capturar comportamentos locais da solução, exigindo a aplicação de modelos adaptativos, refinados à medida que se avança para a região ótima de operação.

As análises multi-fidelidade permitem uma melhor representação do domínio de projeto, pois apesar de empregarem modelos menos acurados ainda utilizam modelos

físicos/numéricos semelhantes à solução de alta-fidelidade. A acurácia da solução pode ser contornada pela utilização de funções de correção globais, representadas por meta-modelos. As funções de correção garantem que a solução ótima encontrada no modelo de baixa-fidelidade corresponda à solução ótima do modelo de alta-fidelidade.

1.1.3 Otimização de distribuidores de Lingotamento contínuo

A maioria dos trabalhos que procuram aperfeiçoar projetos de distribuidores é baseada na comparação experimental ou numérica de um número pré-estabelecido de configurações.

Koria e Singh (1994) utilizam modelos experimentais para avaliar diferentes combinações de modificadores de fluxo⁶. Os autores procuram estabelecer um modelo empírico para os resultados (meta-modelo), porém nenhuma investigação é realizada sobre um possível ponto ótimo de operação. De maneira semelhante, Ramos-Banderas *et al* (2003) utilizam modelos numéricos para avaliar diferentes configurações de distribuidores. Os modelos numéricos são confrontados com resultados experimentais, porém a escolha da configuração ótima consiste apenas na comparação entre as configurações estabelecidas inicialmente. Análises semelhantes são conduzidas por Madias *et al* (1999), Tripathi e Ajmani(2005), Zhong *et al* (2007) , entre outros.

Jha, Dash e Kumar (2001) utilizam planejamento de experimentos computacionais para determinar o ponto ótimo de operação do distribuidor. Jha e Dash (2002) voltam a escrever sobre esta abordagem, procurando ilustrar que os pontos ótimos obtidos no primeiro estudo representavam pontos ótimos globais, e não locais. Entretanto nenhum algoritmo de otimização é empregado pelos autores nestes trabalhos.

Craig *et al* (2001) e De Kock (2005) utilizam algoritmos de otimização no estudo de distribuidores de lingotamento contínuo. Os autores utilizam algoritmos baseados em gradientes, que computam as derivadas com base em meta-modelos locais e adaptativos. Como destacado por De Kock (2005), o algoritmo faz inúmeras chamadas ao modelo de alta-fidelidade, encarecendo o estudo. Além disso, o fato do algoritmo ser baseado em gradientes não garante que a solução encontrada represente um ponto ótimo global, como destacado por De Kock (2005). O autor sugere que novos pontos de partida sejam utilizados no algoritmo para verificar se uma condição melhor de operação é encontrada.

Maciol, Gawad e Podorska (2007) procuram simplificar as análises em estudos de otimização de distribuidores empregando modelos bidimensionais, porém a representação adequada do escoamento por estes modelos não é garantida.

⁶ Modificadores de fluxo representam obstáculos posicionados no interior do distribuidor para alterar o padrão do escoamento no seu interior, procurando aumentar a eficiência do equipamento.

Silva *et al* (2006) utilizam meta-modelos construídos a partir de um planejamento de experimentos computacionais para representar o comportamento global do distribuidor. No entanto a aproximação por meta-modelos globais está sujeita a erros de aproximação, como destacado por Eldred, Giunta e Collis (2004) e Viana *et al* (2004), e assim nenhuma conclusão pode ser estabelecida em relação ao ponto ótimo encontrado representar uma condição ótima local ou global.

1.2 Considerações gerais

A metodologia adotada no presente trabalho combina as duas classes de soluções aproximadas, *i.e.* análises multi-fidelidade e meta-modelos, para reduzir os custos computacionais envolvidos no estudo de otimização de distribuidores. As duas aproximações combinadas permitem que o número e a complexidade das análises fluido-dinâmicas sejam reduzidos durante o processo de otimização, tornando o estudo eficiente, com um tempo de resposta mais aceitável quando comparado às análises tradicionais.

Como os modelos empregados na análise numérica do distribuidor já apresentam simplificações significativas, as análises multi-fidelidade não propõem nenhuma simplificação adicional ao modelo, mas sim a utilização de malhas com diferentes níveis de refino. Os modelos numéricos escolhidos para o problema devem, portanto, apresentar consistência física tanto para as malhas refinadas quanto para as malhas grosseiras, como apresentado no capítulo 03 do presente trabalho.

A utilização de meta-modelos permite ainda que os algoritmos de otimização sejam aplicados em expressões matemáticas de rápida avaliação, e não diretamente nas análises fluido-dinâmicas, contribuindo assim para a utilização de algoritmos robustos, como os genéticos, sem encarecer o estudo.

É importante destacar que a metodologia apresentada neste trabalho não está vinculada a nenhum algoritmo de otimização ou meta-modelo específico. A única recomendação é que os algoritmos de otimização não devem depender das informações das derivadas parciais da solução de baixa-fidelidade.

Vale ressaltar ainda que esta metodologia, além de possibilitar o estudo de otimização de distribuidores, pode ser aplicada em outros problemas empregando análises de mecânica dos fluidos computacional, ou ainda problemas estruturais não-lineares⁷.

⁷ Nestas aplicações os modelos de baixa fidelidade também podem envolver outras simplificações do problema original, como, por exemplo, considerar apenas o comportamento linear das deformações nos modelos de baixa fidelidade.

1.2.1 Ferramentas computacionais

A modelagem matemática dos distribuidores por meio de análises de CFD exige recursos computacionais avançados, e é importante que a ferramenta numérica utilizada para estes fins utilize estes recursos de maneira eficiente.

A eficiência destas ferramentas está relacionada não somente à qualidade e à exatidão do modelo empregado, mas também na maneira como o problema é abordado no âmbito computacional. Técnicas como processamento paralelo das análises, e até mesmo a maneira como os dados são alocados e acessados na memória tem grande influência no desempenho das ferramentas [Siek e Lumsdaine 1998].

De maneira semelhante, as plataformas utilizadas para realizar o estudo de otimização devem, não somente disponibilizar algoritmos de otimização, mas ainda permitir o acoplamento e transmissão de dados entre todas as ferramentas utilizadas na análise do distribuidor. Além disso, devem permitir o monitoramento e gerenciamento dos recursos computacionais disponíveis para a solução do problema, criando filas de processos e acompanhando a resolução dos mesmos.

Percebe-se, portanto, que a implementação de ferramentas adequadas para estudos de otimização exige conhecimentos específicos de programação e computação que fogem ao escopo deste trabalho.

Por este motivo optou-se pela utilização da ferramenta Ansys CFX [ANSYS CFX 2006] para modelagem do escoamento no interior do distribuidor, e da ferramenta modeFrontier [ModeFrontier 2007] como plataforma de otimização e criação de meta-modelos.

A apresentação dos modelos de mecânica dos fluidos computacional, e dos algoritmos de otimização (e meta-modelos) utilizados neste estudo serão apresentados respectivamente nos capítulos 03 e 04.

1.3 Organização do presente trabalho

No capítulo 02 o distribuidor de lingotamento contínuo é apresentado. São destacadas as características desejadas para o escoamento no seu interior, para que a sua eficiência no processo de remoção de inclusões seja aumentada.

O capítulo 03 apresenta a teoria envolvida nas análises de mecânica dos fluidos computacional, e procura destacar as características do modelo numérico que estão relacionadas com a utilização de malhas de diferentes níveis de refino, como as funções de interpolação e a modelagem da turbulência nas regiões próximas à parede. Ao final do capítulo, o modelo computacional do distribuidor é apresentado, quando serão destacadas as condições de contorno e outras características utilizadas na resolução do problema.

O capítulo 04 apresenta a metodologia proposta para a redução dos custos computacionais envolvidos em estudos de otimização de distribuidores. O algoritmo

genético de otimização escolhido para o presente trabalho, NSGA-II é também apresentado, juntamente com os meta-modelos baseados em funções de base radial.

No capítulo 05 os resultados obtidos com a metodologia proposta são apresentados, procurando-se destacar a robustez e a redução dos custos computacionais do problema.

O capítulo 06 traz as conclusões da pesquisa e recomendações para trabalhos futuros.

CAPÍTULO 02

DISTRIBUIDORES DE LINGOTAMENTO CONTÍNUO

O distribuidor, ou *Tundish* do inglês, tem papel fundamental no processo de lingotamento contínuo, constituindo um elo importante entre a panela, que contém o metal líquido proveniente do alto-forno, e o molde, onde o metal inicia o processo de solidificação em direção às esteiras de rolagem. Um esquema representativo de um distribuidor foi apresentado na figura 1.1.

Originalmente os distribuidores atuavam apenas como grandes reservatórios, o que garantia continuidade do lingotamento durante as trocas de panela, e como divisor de fluxo, isto é, direcionando o metal líquido para os diferentes moldes. Observou-se, entretanto, que o longo tempo de permanência do metal no interior do distribuidor poderia ser utilizado para aprimorar a qualidade do material produzido, tanto em relação ao nível de impurezas quanto à composição de ligas metálicas, níveis de temperatura na saída do molde, entre outros [Sahai e Emi 1996].

Devido a estas novas atribuições o distribuidor também passou a ser conhecido como reator [Mazumdar e Guthrie 1999], e uma nova área de pesquisa, denominada de “Metalurgia do *Tundish*”, passou a ganhar destaque nas produções científicas desta área.

Apesar do grande número de atividades desempenhadas pelo distribuidor, três delas ainda podem ser consideradas como sendo as mais importantes: i) a atuação como reservatório durante as trocas de panela; ii) a distribuição do fluxo de metal entre os diferentes veios; iii) a remoção de inclusões pelos mecanismos de flotação e retenção na escória [Mazumdar e Guthrie 1999].

A atuação como reservatório consiste basicamente numa característica geométrica do equipamento, estando relacionada apenas ao seu volume, à altura nominal do banho de metal líquido, e à vazão de operação. A relação entre estas variáveis deve garantir que o fluxo de metal não seja interrompido durante as trocas de panela, e evitar ainda que a altura do banho atinja valores muito baixos, que poderia contribuir para a aspiração da escória em direção aos veios [Thomas *et al* 2003].

Já as atividades de distribuição do fluxo para os múltiplos veios e moldes, e a remoção de inclusões por flotação são fortemente dependentes das características do escoamento no interior do distribuidor, exigindo assim uma avaliação criteriosa do equipamento.

Quanto ao direcionamento de fluxo, o distribuidor deve garantir um escoamento balanceado entre os veios, envolvendo não somente a vazão, mas também a equivalência das propriedades mecânicas e químicas observadas em saídas diferentes do reator. Um possível problema seria, por exemplo, uma diferença de temperatura do material produzido em veios distintos de um mesmo distribuidor. A temperatura do material está relacionada

com a sua velocidade de resfriamento, e conseqüentemente com as propriedades mecânicas que o material irá adquirir. Assim, a diferença de temperatura poderia implicar na produção de materiais distintos numa mesma corrida.

Em relação às inclusões, é possível afirmar que apresentam densidade inferior à do metal sendo produzido, de maneira que o mecanismo de remoção consiste na flotação das mesmas até a superfície do banho, para em seguida serem coletadas pela escória. Para auxiliar este mecanismo, o escoamento deve priorizar fluxos ascendentes, direcionados à superfície, e garantir que o metal permaneça tempo suficiente no interior do distribuidor, contribuindo para que um elevado número de partículas possa atingir a escória [Pereira *et al* 2001].

O fluxo ascendente não deve, entretanto, gerar valores elevados de velocidade próximo à superfície do banho, o que poderia comprometer a integridade da camada de escória e expor o banho de metal líquido à atmosfera, causando a re-oxidação indesejada do material [De Kock 2005].

Alguns autores, como Sahai e Emi (1996) e Mazundar e Guthrie (1999), mencionam que campos de velocidade inadequados poderiam até mesmo prejudicar a qualidade do metal proveniente da panela, destacando assim a importância do estudo do escoamento no interior do distribuidor.

De maneira geral, devem-se evitar regiões de recirculação no interior do equipamento, pois por permanecer confinado neste local o metal pode resfriar-se de maneira distinta ao fluxo principal. A diferença de resfriamento poderia ocasionar um material heterogêneo na saída do distribuidor, ou até mesmo, à solidificação prematura do metal no interior do *Tundish*. Poderia se imaginar que o elevado tempo de residência associado às regiões de recirculação pudesse contribuir para a flotação das inclusões até a superfície do banho, tornando-se uma característica desejável para o escoamento. Porém, o padrão do escoamento nestas regiões dificulta este processo [Sinha e Sahai 1993].

Além disso, o valor do tempo médio de residência para o distribuidor será o mesmo, independente da existência de regiões de recirculação [Sahai e Emi 1996], [Fogler 2002]. Assim, a existência de fluidos com tempos de residência elevados implica na existência de porções de fluido com tempos de residência muito baixos, que permanecem por tempo insuficiente no reator. Este fenômeno é conhecido como curto-circuito, e prejudica, mais uma vez, o mecanismo de remoção das inclusões.

Outra característica desejável para o escoamento no interior do distribuidor é que as regiões com elevado padrão de turbulência sejam localizadas e confinadas nos locais próximos a entrada do domínio. Nesta região as flutuações turbulentas de velocidade podem contribuir para a homogeneização química e térmica do material proveniente da panela, e ainda, para a aglomeração das inclusões em partículas de maior diâmetro, o que facilitaria a flotação das mesmas [Tozawa *et al* 1999]. Por outro lado, níveis elevados de turbulência no

restante do domínio poderiam dificultar a formação de um padrão ascendente para as inclusões, devido à característica randômica das flutuações turbulentas de velocidade [Sinha e Sahai 1993].

Assim, nas demais regiões do domínio procura-se um padrão quiescente para o escoamento, o que justifica a aplicação de dispositivos que visam diminuir ou confinar as flutuações turbulentas de velocidade nas regiões próximas à entrada do domínio. Estes dispositivos, conhecidos como inibidores de turbulência, serão utilizados no estudo de otimização conduzido no capítulo 05.

Outros dispositivos também são utilizados no interior do *Tundish* para auxiliar na obtenção de um escoamento que apresente as características citadas acima. Eles são conhecidos como controladores de fluxo, e serão apresentados com maior detalhamento na seção 2.4.

Fica claro, dessa forma, a importância do padrão de escoamento na determinação da eficiência de um distribuidor de lingotamento contínuo. Contudo, a opacidade do metal, aliada às altas temperaturas observadas em condições reais de produção, dificulta as medições in-loco do escoamento, característica que incita engenheiros e pesquisadores a utilizarem modelos físicos e matemáticos para avaliação do escoamento no interior dos equipamentos.

2.1 Modelagem física

A modelagem física, ou experimental, tem como objetivo avaliar o padrão do escoamento no interior do distribuidor por meio de experimentos em laboratório, ou nos equipamentos reais instalados nas aciarias.

Apesar de algumas técnicas terem sido desenvolvidas para avaliar o escoamento nas condições reais de operação¹, os custos envolvidos nos experimentos são elevados, pois interferem na produção da aciaria, e podem exigir a rejeição do material utilizado nos testes. Além disso, muitas variáveis envolvidas no processo são difíceis de serem controladas, e diminuem a reprodutibilidade do experimento e dificultam a análise de sensibilidade dos parâmetros envolvidos no ensaio.

Já os experimentos em laboratório apresentam uma grande reprodutibilidade, e envolvem custos muito inferiores aos ensaios realizados nas aciarias, o que estabelece uma

¹ Um exemplo de avaliação do escoamento no interior de um distribuidor operando em condições reais de operação consiste na injeção de cobre, como um traçador, na entrada do domínio. A concentração de cobre é então monitorada ao longo de amostragens extraídas do molde na saída do distribuidor, e a variação da concentração ao longo do tempo pode ser utilizada para reconstruir a curva de distribuição dos tempos de residência do equipamento (seção 2.1.2). Mais informações sobre este experimento podem ser encontradas em [De Kock 2005].

metodologia simples e eficiente para análise da performance do *Tundish*. Nestes experimentos, modelos em escala são geralmente utilizados para reproduzir o comportamento dos equipamentos reais. O material refratário utilizado nas paredes do equipamento real é substituído por um material transparente, como o acrílico, e o fluido de trabalho é substituído, muitas vezes, pela água, que quando combinada a traçadores, permite a visualização do escoamento no interior do modelo.

A escolha da água como fluido de trabalho não está relacionada unicamente com a sua transparência, mas também com a proximidade entre os valores de viscosidade cinemática do aço e da água, como apresentado na tabela 2.1. A semelhança faz com que modelos aquosos tornem-se excelentes ferramentas no estudo dos fenômenos de transporte, não somente em distribuidores, mas em diversos reatores metalúrgicos, como panelas, fornos, entre outros [Mazumdar e Guthrie 1999].

A aplicação dos modelos citados requer apenas que as condições de similaridade entre o escoamento real e aquele reproduzido em laboratório sejam respeitadas.

Tabela 2.1 – Propriedades físicas da água e do aço. Fonte Mazumdar (1999).

Propriedade	Água (20° C)	Aço (1600°C)
Viscosidade Molecular (μ), [kg/(m.s)]	0.001	0.0064
Densidade (ρ), [kg/m ³]	1000	7014
Viscosidade Cinemática ($\nu = \mu / \rho$), [m ² /s]	10 ⁻⁶	0.913x10 ⁻⁶

2.1.1 Condições de similaridade

Para que os resultados obtidos nos modelos em escala possam ser associados ao comportamento dos equipamentos reais, é fundamental que os experimentos apresentem similaridade geométrica e dinâmica com os modelos originais.

A similaridade geométrica exige que todas as dimensões do modelo reduzido possuam um fator de escala constante, λ , para as dimensões correspondentes do modelo original. O nível de altura do banho também deve respeitar a mesma relação [Sahai e Burval 1992].

A similaridade dinâmica exige que a relação entre as principais forças atuando numa partícula fluida no modelo reduzido seja similar à relação observada no equipamento real. As principais forças atuando no escoamento no interior do Tundish são as forças viscosas, gravitacionais, e a inércia do escoamento [Makundar e Guthrie 1999]. A relação entre as forças viscosas e inerciais é representada pelo número de Reynolds, enquanto que a relação entre as forças gravitacionais e inerciais é representada pelo número de Froude.

Assim a equivalência dos números de Reynolds e Froude entre modelos reais e em escala pode ser utilizada para garantir a similaridade dinâmica entre os mesmos.

Entretanto, nos modelos em escala reduzida ($\lambda \neq 1$) utilizando água como fluido de trabalho torna-se impossível respeitar a equivalência simultânea dos números de Froude e Reynolds, devido à proximidade dos valores de viscosidade cinemática entre a água e o aço. Nestes casos, a influência de um dos números deve ser renunciada, optando-se pela similaridade do valor que melhor representar o escoamento.

Muitos estudos publicados na área de metalurgia do *Tundish* indicam que o escoamento no interior dos distribuidores de lingotamento contínuo é dominado pelas forças inerciais e gravitacionais, sendo assim caracterizados pelo número de Froude [Kemeny *et al* 1981], [Knoepke e Mastervich 1986], [Chiang 1992] e [Koria e Singh 1994]. A equivalência do número de Froude também pode ser expressa em função das vazões volumétricas de operação do modelo real e reduzido, e do fator de escala entre os modelos, λ , de acordo com a equação a seguir [Mazumdar e Guthrie 1999]:

$$Q_{MOD} = Q_{REAL} \cdot \lambda^{5/2} \quad (2.1)$$

É importante destacar que os distribuidores operam com vazões constantes na maior parte da sua operação. A única exceção ocorre durante as trocas de panela, quando o fluxo de metal é interrompido, causando a alteração da altura de banho e conseqüentemente da pressão ferrostática no interior do equipamento.

Apesar de alguns parâmetros importantes estarem relacionados com a troca de panelas², este fenômeno representa um curto espaço de tempo em relação ao tempo total de operação do distribuidor. Assim, as análises numéricas e experimentais consideram distribuidores operando em vazões constantes, como apresentado na seção 1.1.1.

É importante destacar que as similaridades apresentadas nesta seção dizem respeito a experimentos realizados em modelos aquosos, nos quais os efeitos de transferência de calor e eventuais reações químicas presentes no equipamento real não estão sendo consideradas. Caso seja necessário reproduzir estes processos nos modelos em escala, outras similaridades deveriam ser respeitadas, como as térmicas e químicas [Daoud 2006].

² Um parâmetro importante avaliado durante as trocas de panela representa a quantidade de material rejeitado por representar uma mistura entre duas panelas consecutivas. Como a rejeição ocorre após a solidificação do metal nas esteiras de rolagem, o parâmetro é identificado pelo comprimento do material sendo rejeitado, ou simplesmente “comprimento de mistura”.

2.1.2 Resultados

Dentre os principais resultados esperados na modelagem física dos distribuidores de lingotamento contínuo estão a inspeção do padrão de escoamento no interior do equipamento e a obtenção da curva de distribuição dos tempos de residência (DTR).

Em relação à análise do padrão do escoamento no interior do distribuidor, a qualidade dos resultados evoluiu da inspeção visual e subjetiva, realizada com a adição de traçadores, para medições precisas do campo de velocidades utilizando técnicas como as medições de velocidade por imagem de partícula (PIV)³ [Solorio-Diaz *et al* 2004]. Apesar das grandes potencialidades apresentadas pelo PIV, a aplicação destas técnicas envolve um investimento superior aos experimentos tradicionais que utilizam traçadores, tornando o experimento pouco difundido no meio acadêmico e industrial.

Já um experimento tradicional na modelagem física de distribuidores consiste na obtenção da curva de Distribuição dos Tempos de Residência (DTR) do equipamento. O experimento baseia-se na injeção de um traçador (tinta, ácido ou sal) na entrada do domínio na forma de um pulso, ilustrado na Figura 2.1(a). A injeção de traçador corresponde ao início do experimento ($t=0s$), e a partir deste instante a sua concentração é monitorada ao longo do tempo nas diferentes saídas (veios) do equipamento.

A dispersão temporal dos valores de concentração do traçador avaliados na saída do modelo, ilustrado na Figura 2.1(b), é relacionada então com a distribuição dos tempos de residência (DTR) do equipamento [Sahai e Emi 1996]. Esta curva representa o histograma dos tempos de residência esperados para uma massa de metal injetada uniformemente na entrada do distribuidor.

Como mencionado anteriormente, os tempos de residência estão diretamente relacionados com o processo de remoção de inclusões por flotação, e com a existência de regiões indesejadas de recirculação no interior do domínio. Assim, os experimentos em laboratório provêm ao engenheiro informações valiosas acerca do modelo analisado, corroborando para a utilização em larga escala destes experimentos, conforme destacado por [Sahai e Emi 1996] e [Mazumdar e Guthrie 1999] .

³ A tecnologia de medições de velocidade por imagem de partícula consiste na adição de partículas especiais ao escoamento, cuja influência no escoamento deve ser desprezível. Estas partículas podem ser rastreadas por um sistema auxiliar, que analisa imagens geradas por feixes planares de laser estrategicamente posicionado ao longo do domínio. A análise das imagens permite a determinação da posição das partículas, e a comparação das imagens geradas entre dois pulsos consecutivos do laser permite o cálculo da distância percorrida por cada partícula, determinando a velocidade instantânea do fluido. Informações adicionais sobre esta tecnologia podem ser encontradas em [Raffel, Willert e Kompenhans 1998] e [ADRIAN 2004].

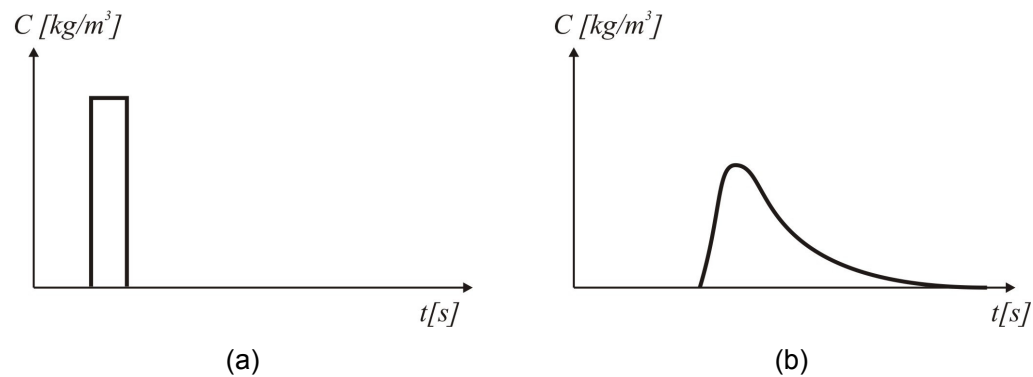


Figura 2.1 – Representação do pulso de traçador injetado na entrada do domínio(a), e a dispersão do mesmo obtido na saída(b). O início da injeção do traçador corresponde ao início do experimento ($t=0\text{s}$).

A grande desvantagem destes experimentos está associada à dificuldade em se realizar análises paramétricas, pois as mesmas envolveriam a construção de diversos modelos emacrílico.

A seção 2.3 indica como os resultados obtidos nestes ensaios são tratados, permitindo a comparação entre distribuidores distintos, operando com vazões e alturas de banho diferentes. Esta metodologia de comparação é imprescindível para o estudo de otimização realizado no presente trabalho.

Além dos resultados comentados nesta seção, alguns experimentos visam ainda reproduzir o comportamento das inclusões e variações de temperatura no interior do distribuidor. Embora eles não apresentem uma boa correlação com os equipamentos reais, devido à dificuldade de se respeitar todas as condições de similaridade envolvidas, ainda assim podem fornecer resultados qualitativos importantes acerca do comportamento das inclusões e do campo de temperaturas no interior do distribuidor [Mazumdar e Guthrie 1999].

2.2 Modelagem matemática

A modelagem matemática engloba todas as metodologias que representam os fenômenos físicos que ocorrem no interior do distribuidor por um conjunto de equações. Historicamente os modelos matemáticos surgiram de relações empíricas ou semi-analíticas que procuravam descrever as principais características dos distribuidores utilizando equações de fácil manipulação, devido ao escasso recurso computacional disponível na época [Levenspiel 1974].

Estes modelos são conhecidos na literatura como modelos unidimensionais (1D), por descreverem o comportamento de fenômenos físicos complexos por meio de equações simplificadas, baseadas em características macroscópicas do problema sendo resolvido.

Apesar do grande número de simplificações adotadas nestes modelos, a confecção destes exigia uma importante dedicação do meio científico no estudo de modelos que descrevessem de maneira adequada o escoamento no interior do distribuidor, e de inúmeras comparações com ensaios em laboratório. Como consequência, trouxeram importantes contribuições para a metalurgia do *Tundish*, como por exemplo, a determinação das variáveis utilizadas para caracterização dos distribuidores, apresentadas na seção 2.3 [Sahai e Emi 1996].

Com a crescente disponibilidade de recursos computacionais, os modelos 1D passaram a coexistir com modelos bidimensionais (2D), que apesar de ainda adotarem simplificações significativas em relação ao problema real, já empregavam técnicas numéricas [Debroy e Sychterz 1985]. Diferentemente dos modelos 1D, as análises bidimensionais procuravam representar detalhes geométricos do equipamento.

Apesar dos resultados reveladores, estudos posteriores comprovaram que o escoamento no interior do distribuidor apresenta características tridimensionais importantes, que não podiam ser detectadas nas análises bidimensionais [He e Sahai 1987]. Com o surgimento de novas técnicas para geração e tratamento de malhas em geometrias complexas (ver, por exemplo, [Maliska 1995]), as análises tridimensionais (3D) passaram então a incorporar as modelagens matemáticas de distribuidores de lingotamento contínuo, tornando-se desde então a metodologia mais aplicada para a avaliação numérica do desempenho destes equipamentos [Mazumdar e Guthrie 1999].

A grande vantagem dos modelos 3D em relação às análises 1D e 2D é a reprodução geométrica fiel dos modelos reais, permitindo a análise da influência de diferentes parâmetros construtivos no desempenho do reator, sem a necessidade da construção física dos modelos necessários para as análises experimentais.

Além disso, as análises numéricas respeitam automaticamente todas as condições de similaridade apresentadas na seção 2.1.1, já que as dimensões geométricas e as propriedades do fluido utilizadas no modelo computacional procuram reproduzir de maneira rigorosa aquelas observadas no problema real.

As soluções numéricas permitem ainda a análise de fenômenos importantes, dificilmente incluídos na modelagem experimental, como a análise da trajetória de inclusões não metálicas, e a contribuição da convecção natural ao escoamento do metal no interior do equipamento.

A modelagem matemática dos distribuidores por meio da mecânica dos fluidos computacional será apresentada no capítulo 03.

2.3 Caracterização dos distribuidores

Devido ao grande número de configurações que os distribuidores podem assumir, é importante que parâmetros sejam definidos, de maneira que a caracterização e comparação de desempenho entre diferentes configurações possam ser realizadas.

As técnicas aplicadas para caracterização dos distribuidores surgiram com a analogia entre o papel desempenhado pelo *Tundish* e aquele desempenhado por reatores químicos [Sahai e Ahuja 1986]. Em ambos os casos deseja-se que diferentes porções do fluido de trabalho permaneçam por tempos semelhantes no interior do equipamento. Equipamentos que apresentam grandes variações de tempos de residência, devido a presença de regiões de estagnação (zonas mortas) ou curto-circuito, são indesejados, tanto no caso dos reatores químicos [Fogler 2002], quanto no caso de distribuidores de lingotamento contínuo [Sahai e Emi 1996]. Assim a caracterização e análise de desempenho de distribuidores e reatores químicos residem basicamente na análise das curvas de distribuição dos tempos de residência.

O primeiro parâmetro que caracteriza o distribuidor é o tempo teórico de residência, T , definido pela relação entre o volume ocupado pelo metal no interior do distribuidor, V_D , e a vazão volumétrica de operação do equipamento, Q_D :

$$T = \frac{V_D}{Q_D} \quad (2.2)$$

O tempo teórico define o tempo de residência esperado para um distribuidor ideal, e será utilizado na definição de outros parâmetros apresentados a seguir.

Para estabelecer um critério de comparação, deve-se lembrar primeiramente que equipamentos distintos apresentam tempos teóricos de residência diferentes, e até mesmo os modelos em escala podem apresentar tempos teóricos diversos do modelo real que procuram representar. Assim, o primeiro passo para caracterização dos distribuidores consiste na adimensionalização da curva DTR, definindo escalas de tempo proporcionais ao tempo teórico de residência e níveis de concentração proporcionais à massa de traçador injetada no domínio.

A definição da escala de tempo adimensional, θ , consiste na divisão entre o tempo decorrido desde o início da injeção do traçador, t , pelo tempo teórico de residência, T , de acordo com a equação a seguir:

$$\theta = \frac{t}{T} \quad (2.3)$$

De maneira semelhante ao tempo teórico de residência, um valor de referência para a concentração, C_r , deve ser utilizado para a adimensionalização desta variável. O valor de C_r representa a concentração obtida caso a massa de traçador injetada no domínio, m_t ,

fosse distribuída uniformemente ao longo de todo o volume ocupado pelo metal no interior do distribuidor [Mazumdar e Guthrie 1999], de acordo com a equação abaixo:

$$C_r = \frac{m_t}{V_D} \quad (2.4)$$

Assim o valor normalizado de concentração, C , utilizado nas curvas DTR é obtido pela equação:

$$C = \frac{c}{C_r} \quad (2.5)$$

O gráfico da variável C em função do tempo adimensional, θ , caracteriza as curvas DTR geralmente utilizadas para caracterização e comparação de distribuidores.

Uma característica importante da função $C(\theta)$ é que a integração da função entre dois instantes de tempos adimensionais, θ_1 e θ_2 , representa a fração de material que apresenta tempo de residência neste intervalo⁴.

$$\left[\begin{array}{c} \text{Fração de material que apresenta} \\ \text{tempos de residência entre } \theta_1 \text{ e } \theta_2 \end{array} \right] = \int_{\theta_1}^{\theta_2} C(\theta) d\theta \quad (2.6)$$

Portanto a integral da função $C(\theta)$ entre $\theta = 0$ e $\theta \rightarrow \infty$ corresponde à unidade:

$$\int_0^{\infty} C(\theta) d\theta = 1 \quad (2.7)$$

A Figura 2.2 ilustra uma curva DTR típica obtida em distribuidores de lingotamento contínuo. Na figura, observa-se uma ascensão rápida de concentração, representando a chegada do escoamento principal nas saídas do domínio, seguida por uma queda monótona, relacionada às porções fluidas que permanecem no interior do distribuidor por longos períodos de tempo (zonas mortas). Na figura ainda são destacadas a posição do tempo teórico de residência ($\theta=1$), e a posição relativa a duas vezes este valor ($\theta=2$), que

⁴ Em muitas casos deseja-se obter uma equação semelhante a 2.6, mas que permita a avaliação do tempo de residência na forma dimensional. Esta equação é conhecida como função de distribuição de tempos de residência [Fogler 2002], sendo muitas vezes identificada como $E(t)$.

As duas variáveis, E e C , respectivamente a idade do fluido e idade adimensional do fluido, estão relacionadas pelo tempo teórico de residência, de acordo com a equação:

$$C = E \cdot T,$$

de maneira que:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Fração de material que apresenta} \\ \text{tempos de residência entre } t_1 \text{ e } t_2 \end{array} \right] = \int_{t_1}^{t_2} E(t) dt$$

representam parâmetros importantes no cálculo dos volumes característicos atribuídos ao distribuidor.

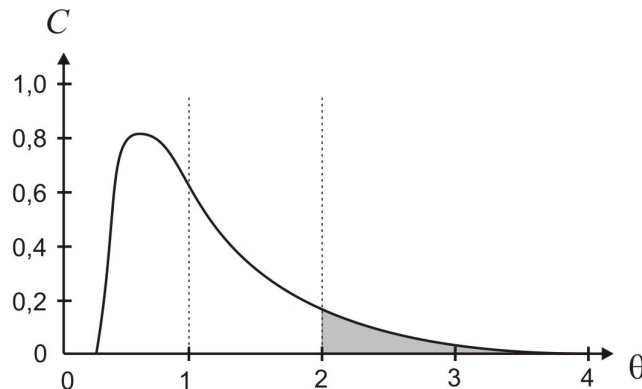


Figura 2.2 – Figura ilustrando uma curva típica de distribuição de tempo de residência para um distribuidor.

2.3.1 Volumes Característicos

As variáveis identificadas como volumes característicos procuram classificar o escoamento no interior do distribuidor em três regiões volumétricas distintas:

- V_M : Volume Morto
- V_X : Volume de Mistura
- V_p : Volume *Plugado*

O volume morto está relacionado com as porções fluidas que permanecem no interior do distribuidor por tempos superiores a duas vezes o tempo teórico de residência ($\theta > 2$). Este volume está associado com as regiões de recirculação, onde o material estagnado não é renovado, devido à baixa troca de material entre estas regiões e o escoamento principal [Mazumdar e Guthrie 1999].

Como apresentado na introdução deste capítulo, as zonas mortas estão associadas com a formação de materiais heterogêneos na saída do molde, problemas de solidificação prematura e formação de curto-circuito. A sua presença prejudica de maneira geral o processo de remoção de inclusões e obtenção de um material de alta qualidade, devendo ser minimizada para obtenção de um distribuidor eficiente.

Para analisar os volumes característicos restantes deve-se, primeiramente, considerar o comportamento de um reator ideal. Tal equipamento apresentaria o mesmo tempo de residência para todo fluido atravessando o domínio, ou seja, a mistura entre materiais injetados em instantes de tempo diferentes seria inexistente. Para exemplificar esta situação costuma-se associar o movimento do fluido no interior deste reator com o movimento de um pistão, ou plugue, com fronteiras perfeitamente delimitadas. Esta associação dá origem ao termo volume *plugado*.

Na prática os distribuidores não conseguem reproduzir o comportamento de um reator ideal, apresentando uma grande dispersão dos tempos de residência, que indica a mistura entre materiais injetados em instantes distintos. A dispersão dos tempos de residência dá origem ao termo volume de mistura.

É importante perceber que uma pequena dispersão dos tempos de residência pode, em muitos casos, ser benéfica, já que a mistura controlada poderia corroborar para a homogeneização térmica e química do metal [Mazumdar e Guthrie 1999]. Por outro lado, uma grande dispersão dos tempos de residência acabaria prejudicando a qualidade do metal, pois indicaria a co-existência de porções fluidas com tempos de residência muito baixos (curto-circuito) e muito elevados (zonas-mortas).

As frações de volume *plugado* e volume de mistura estão relacionados, portanto, com o nível de dispersão dos tempos de residência no interior do equipamento. O volume *plugado* representa as porções fluidas que apresentam o mesmo tempo de permanência no interior do *Tundish*, enquanto o volume de mistura indica a magnitude das regiões de mistura.

O aumento de volume *plugado*, ou redução da dispersão dos tempos de residência, representa assim uma característica desejada para o escoamento, pois promove a redução dos problemas de curto-circuito e zonas mortas entre a entrada e a saída do domínio.

Assim deseja-se a coexistência de volumes de mistura e volume *plugado*, enquanto o volume morto deve ser reduzido para os menores valores possíveis.

Segundo [Sahai e Emi 1996], a determinação da fração de material associada ao volume morto pode ser estimada então pela seguinte equação:

$$V_M = 1 - \left[\int_0^2 C(\theta) d\theta \right] \cdot \bar{\theta}_C \quad (2.8)$$

na qual a integral representa a porção de fluido que possui tempo de residência inferior a duas vezes o tempo teórico de residência, e $\bar{\theta}_C$ representa o tempo de residência médio adimensional entre $\theta=0$ e $\theta=2$, dado pela equação:

$$\bar{\theta}_C = \frac{\int_0^2 \theta C d\theta}{\int_0^2 C d\theta} \quad (2.9)$$

A redução da área da curva associada a valores de θ maiores do que 2 irá minimizar a parcela de material associada com o volume morto, tornando-se um dos objetivos do estudo de otimização apresentado no presente trabalho.

Alguns autores propõem cálculos semelhantes para as parcelas de volume de mistura e volume *plugado* [Sahai e Emi 1996], e indicam que a combinação destes dois volumes representa a parcela ativa do escoamento, em oposição ao volume morto.

No entanto a escolha entre as proporções de volume de mistura e volume *plugado* na parcela ativa do escoamento não apresenta um consenso tão definido quanto a redução da parcela de volume morto. De uma maneira geral as regiões de mistura são desejadas, mas devem ser restritas a uma fração mínima do domínio, já que o padrão do escoamento nestas regiões pode dificultar a flotação das inclusões [Daoud 2006].

[Fogler 2002] e [Koria e Singh 1994] propõem a avaliação da proporção entre as frações de volume de mistura e volume *plugado* para uma curva DTR genérica, analisando a variância da curva, σ^2 :

$$\sigma^2 = \frac{\int_0^{\infty} (\theta - \bar{\theta})^2 C d\theta}{\int_0^{\infty} C d\theta} \quad (2.10)$$

na qual $\bar{\theta}$ representa o tempo médio da curva DTR, sendo obtido pela substituição do limite superior de integração da equação 2.9 de 2 para ∞ .

Valores de variância próximos a zero indicam a predominância do volume *plugado* na parcela ativa do escoamento, enquanto valores elevados indicariam a predominância do volume de mistura.

De uma maneira geral procura-se por valores de variância mais baixos possíveis, indicando a predominância do volume *plugado* e que os problemas de curto-circuito e regiões mortas estariam sendo reduzidos. Além disso, em função da complexidade do escoamento e da geometria do distribuidor, as regiões de mistura seriam dificilmente erradicadas do domínio [Fogler 2002]. Desta maneira a variância nunca chegaria a zero, garantindo a mistura controlada que poderia contribuir para a homogeneização do material.

2.3.2 Tempos Característicos

Além dos volumes característicos apresentados na seção anterior, as curvas DTR também permitem a determinação de tempos característicos, relacionados com diferentes eventos ocorrendo no interior do distribuidor.

Os tempos característicos são apresentados a seguir:

- θ_{\min} = Tempo mínimo de residência, associado com a aparição do primeiro traço de concentração detectado na saída do distribuidor.
- θ_{pico} = Tempo correspondente ao máximo valor de concentração observado na saída do distribuidor.

Além dos tempos mencionados acima, o tempo teórico de residência (T) e o tempo médio da DTR ($\bar{\theta}$) também são classificados como tempos característicos do distribuidor.

2.4 Controladores de Fluxo:

A configuração original de um distribuidor de lingotamento contínuo, como os ilustrados na Figura 1.1 e Figura 2.4(a) oferece pouco controle sobre o escoamento no seu interior, trazendo poucas garantias sobre o desempenho do equipamento.

Para auxiliar na obtenção de tempos e volumes característicos apropriados, os engenheiros têm a sua disposição peças constituídas de material refratário cujo único objetivo é alterar o padrão do escoamento no interior do distribuidor.

Os principais controladores de fluxo utilizados em distribuidores são as barragens, diques, tampões e inibidores de turbulência, [Koria e Singh 1994], [Palafox *et al* 2001], ilustrados respectivamente nas Figura 2.3 a, b, c e d.

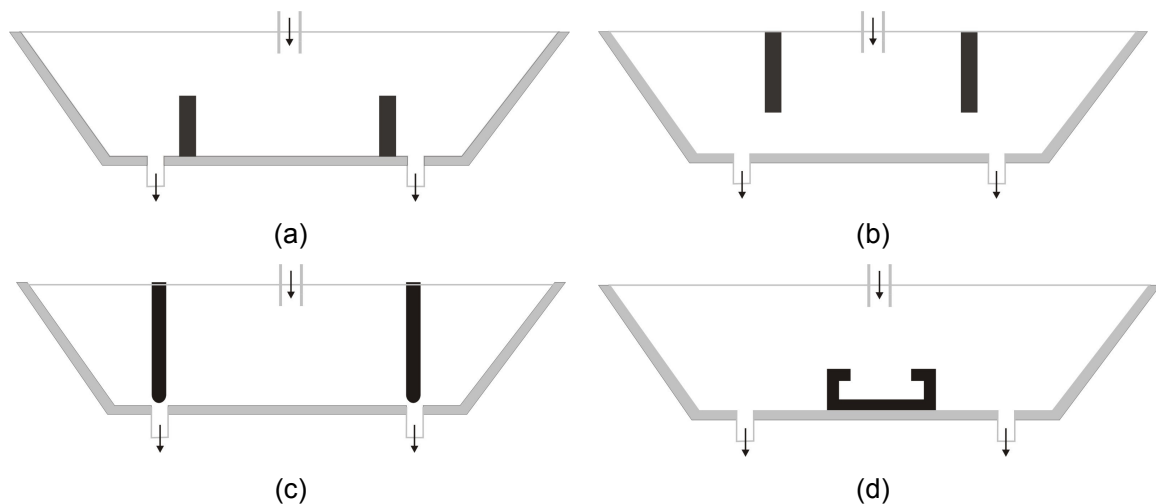


Figura 2.3. Dispositivos de controladores de fluxo destacados em negrito. (a) Barragens, (b) Diques, (c) Tampões, (d) inibidores de turbulência.

2.4.1 Diques e Barragens

As barragens estendem-se do fundo do distribuidor até uma altura inferior à camada de escória. São geralmente utilizadas para eliminar problemas de curto-circuito entre a entrada e saída do domínio, aumentando o tempo mínimo de residência. A presença das barragens também direciona o fluxo de metal para a superfície, o que auxilia no processo de remoção de inclusões [Koria e Singh 1994].

Os diques possuem orientação contrária às das barragens, estendendo-se de regiões superiores à camada de escória até uma altura superior ao fundo do distribuidor. A utilização dos diques como único dispositivo controlador de fluxo é pouco comum, pois isolados não apresentam ganhos significativos de desempenho [Koria e Singh 1994]. Os diques são geralmente utilizados em conjunto com as barragens, aumentando o tempo de residência no distribuidor mediante o aumento da distância percorrida pelo metal [Daoud 2006], como ilustrado na Figura 2.4.

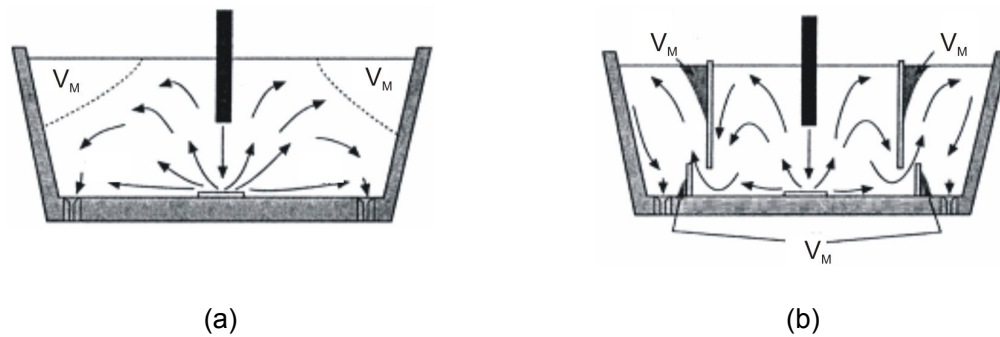


Figura 2.4. Ilustração do padrão de escoamento sem a presença de controladores de fluxo (a) e com a presença de controladores de fluxo (b). (Fonte: Shade 1996).

2.4.2 Tampões

Os tampões, apesar de não contribuírem para a melhoria dos volumes e tempos característicos, têm o importante papel de evitar a formação de vórtices próximos aos veios do distribuidor. Este fenômeno pode ocorrer durante as trocas de panela, quando os níveis do banho podem atingir valores relativamente baixos [Thomas *et al* 2003].

O posicionamento destes dispositivos auxilia ainda no controle da vazão de metal em direção aos veios.

2.4.3 Inibidores de Turbulência

Os inibidores de turbulência são posicionados abaixo do tubo longo, recebendo o jato de metal proveniente da panela, como ilustrado na Figura 2.3 d.

O objetivo principal destes dispositivos é conter os níveis elevados de velocidade do escoamento nas regiões próximas à entrada do distribuidor, fazendo com que o restante do domínio apresente valores baixos de velocidade [Daoud 2006]. As altas velocidades geradas na região do inibidor de turbulência contribuem para a mistura e conseqüentemente para a homogeneização do metal proveniente da panela. O padrão do escoamento nesta região também promove a colisão e coalescência de inclusões, fato que aumenta as chances de serem coletadas na escória [Sinha e Sahai 1993].

O confinamento dos picos de velocidade nesta região também proporciona um escoamento quiescente no restante do domínio, o que contribui para a formação de um padrão ascendente para a velocidade relativa das inclusões [Daoud 2006].

A presença do inibidor de turbulência evita ainda a formação de um curto-circuito entre a entrada do domínio e as saídas em direção ao molde, e auxilia na formação de um padrão ascendente para as velocidades.

Além disso, ao serem posicionados abaixo do tubo longo, os inibidores evitam o contato direto do jato de metal proveniente da panela com as paredes do distribuidor e reduzem o desgaste do equipamento.

Por último, deve-se mencionar a contribuição do equipamento na partida da máquina, o que minimiza os problemas de emulsificação e arraste da escória.

Apesar das vantagens adquiridas com a utilização de um inibidor de turbulência, a definição das suas dimensões constitui uma tarefa difícil, em função do grande número de variáveis a serem especificadas, e da complexa interação entre as variáveis e o escoamento. Por este motivo a parametrização do inibidor de turbulência foi escolhida para aplicação da metodologia de otimização, proposta no presente trabalho.

2.4.4 Projeto dos Controladores de Fluxo

Embora os controladores de fluxo apresentem um grande potencial para melhoria do padrão de escoamento no interior do *Tundish*, o dimensionamento, posicionamento e combinação destes dispositivos (do ponto de vista da mecânica dos fluidos) ainda residem na experiência adquirida em projetos anteriores ou na resolução de uma pequena quantidade de ensaios numéricos ou experimentais.

A aplicação desta metodologia dificulta a melhoria contínua do equipamento, já que os resultados obtidos em configurações anteriores nem sempre poderão ser aplicados com sucesso em novos projetos, devido à complexa interação entre o escoamento, a geometria do distribuidor e os controladores de fluxo.

Assim percebe-se, uma vez mais, a necessidade de uma metodologia para reduzir o custo computacional das análises numéricas de distribuidores, com intuito de viabilizar o acoplamento entre estes modelos e diferentes algoritmos de otimização.

2.5 Integridade da Escória

Além de se desejar que o padrão do escoamento no interior do *Tundish* proporcione a remoção de inclusões, deve-se atentar ainda para que o campo de velocidades não prejudique a integridade da camada de escória.

A ruptura da camada de escória iria expor o banho de metal líquido para a atmosfera, e causaria a oxidação do metal, acelerada pelas altas temperaturas envolvidas no processo. O material oxidado poderia ser direcionado para os moldes, o que comprometeria a qualidade do metal produzido.

O padrão ascendente desejado para o escoamento no interior do distribuidor, dessa forma, não deve gerar valores elevados de velocidade nas proximidades da escória, garantindo a estabilidade da mesma [Daoud 2006].

Apesar de não existir uma correlação entre os níveis de velocidade nas proximidades da escória e a ruptura da mesma, estes valores serão monitorados durante as análises numéricas, garantindo que dentre as melhores configurações, aquelas que apresentarem os menores valores de velocidade máxima nas proximidades da escória sejam escolhidas.

2.6 Inclusões

Como destacado nas seções anteriores, uma das principais atribuições do distribuidor é a sua contribuição para remoção das inclusões, auxiliando na produção de produtos que atendam às restritas especificações do mercado em relação ao máximo nível de impurezas do material.

As inclusões atuam como concentradores de tensão no metal solidificado e estão relacionadas com a redução da tensão de ruptura e da resistência, formação de trincas e à fadiga do material. As propriedades mecânicas do metal estão, portanto, diretamente relacionadas com o tamanho, distribuição, composição química e morfologia das inclusões [Zhang e Thomas 2003]. Além da alteração das propriedades mecânicas, as inclusões também estão relacionadas com o acabamento superficial do metal, podendo causar a rejeição do material. Ex.: produção de laminados para a indústria automotiva. [Sinha e Sahai 1993]

As especificações em relação ao tamanho máximo de inclusões estão diretamente relacionadas com a aplicação final do produto, conforme apresentado na Tabela 2.2.

Tabela 2.2 – Tamanho máximo de inclusões exigidas para diferentes produtos. Fonte Zhang e Thomas (2003).

Produtos	Máximo tamanho permitido para inclusões (µm)
Laminados para indústria Automotiva	100
Gasodutos/Oleodutos	100
Arames/fios em geral	20
Esferas para rolamento	15
Fios para lona de pneus automotivos	10

O surgimento das inclusões no processo de lingotamento contínuo está relacionado a agentes que atuam tanto internamente ao banho de metal (inclusões endógenas), quanto a agentes externos (inclusões exógenas).

As inclusões exógenas estão relacionadas principalmente ao desgaste e erosão do material refratário, podendo ser originadas nas paredes da panela, distribuidor e controladores de fluxo. O arrasto da camada de escória para o banho de metal também é caracterizado como inclusão exógena [Sinha e Sahai 1993].

As inclusões endógenas estão relacionadas com os produtos gerados durante a desoxidação do metal, realizada nas etapas anteriores ao despejo do metal no distribuidor.

As inclusões endógenas são, portanto, inerentes ao processo de lingotamento contínuo, já que a etapa de desoxidação não pode ser eliminada do processo de obtenção do aço, e por este motivo, serão consideradas nas análises apresentadas nos capítulos seguintes⁵.

Dentre as inclusões endógenas destacam-se a Alumina (Al_2O_3) e a sílica (SiO_2), geradas na adição de alumínio e silício para a desoxidação do aço. Estas inclusões apresentam originalmente tamanhos entre 1 e $5\mu\text{m}$ [Zhang e Thomas 2003], mas o elevado grau de agitação e turbulência do escoamento associado à elevada energia de interface das inclusões acaba por contribuir na colisão e coalescência das mesmas em aglomerados com maior comprimento [Zhang e Thomas 2003] e [Tozawa *et al* 1999].

Assim, para analisar o comportamento dos diferentes tamanhos observados no distribuidor, as análises realizadas no presente estudo consideram partículas com diferentes tamanhos característicos (5, 30, 50 e $100\mu\text{m}$).

Sendo menos densas que o metal, o princípio básico de remoção das inclusões consiste na flotação das mesmas até a escória em função do empuxo.

Por este motivo o material escolhido para caracterização das partículas foi a alumina, pois ela apresenta uma densidade superior a da sílica e, portanto, menor flotabilidade no banho de metal líquido. Deste modo, a análise da quantidade de partículas de alumina coletadas na escória consiste em uma avaliação conservativa do processo de remoção de inclusões no distribuidor.

⁵ A remoção das inclusões exógenas será analisada somente de maneira indireta, com a avaliação do desempenho do distribuidor pelos seus volumes e tempos característicos.

CAPÍTULO 03

FORMULAÇÃO NUMÉRICA

A mecânica dos fluidos computacional, também conhecida como CFD pelas suas iniciais na literatura inglesa (*Computational Fluid Dynamics*), é a área de estudos que trata das metodologias para a solução aproximada das equações de conservação que regem problemas de escoamentos de fluidos.

Diferentes metodologias podem ser incluídas, classificadas pela maneira como resolvem as equações de conservação associadas ao problema. Como exemplo, pode-se mencionar o método das diferenças finitas (MDF), elementos finitos (MEF) e volumes finitos (MVF).

Dentre os métodos mencionados acima, o baseado em volumes finitos destaca-se pelo seu princípio conservativo, que respeita o balanço das propriedades físicas em nível discreto para qualquer refino de malha [Maliska 2004]. Esta característica torna o método mais adequado para as análises multi-fidelidade baseadas em malhas de diferentes refinamentos e, por este motivo, o método foi adotado no presente trabalho.

A metodologia de volumes finitos empregada neste estudo consiste na formulação dos volumes finitos baseada em elementos (EbFVM), implementada na ferramenta Ansys CFX [Schneider and Raw 1986, Maliska 2004, ANSYS CFX 2006].

O estudo da metodologia, neste capítulo, inicia com a apresentação das equações de conservação, comuns a todas as metodologias de mecânica dos fluidos computacional, para em seguida ilustrar o processo de obtenção das equações aproximadas pelo método EbFVM.

Apesar das análises fluido-dinâmicas realizadas no presente trabalho utilizarem modelos numéricos amplamente conhecidos, é importante que características gerais dos modelos sejam apresentadas, para destacar a aplicabilidade dos mesmos na resolução do escoamento no interior do distribuidor.

A par disso, a utilização de malhas com diferentes níveis de refino nas análises multi-fidelidade possui relação direta com a acurácia e limitações associadas aos modelos numéricos e exigem a análise do princípio de funcionamento destes modelos e dos erros numéricos que contaminam a solução do problema. Por tais razões, o capítulo destaca a importância de se utilizar funções de interpolação adequadas e de modelos de turbulência que sejam fisicamente consistentes para qualquer refino de malha nas regiões próximas à parede.

No final do capítulo a construção do modelo utilizado para a análise do distribuidor será apresentado, ilustrando a geometria, condições de contorno, malhas e simplificações adotadas no problema.

3.1 Equações de Conservação

As equações de conservação associadas aos problemas de mecânica dos fluidos são obtidas a partir dos princípios básicos de conservação de massa, quantidade de movimento e energia. A conservação destas grandezas é popularmente conhecida na análise de sistemas termodinâmicos fechados¹, onde assumem a forma das leis de conservação de massa, segunda lei de Newton e primeira lei da Termodinâmica.

Ao serem aplicadas na análise de volumes de controle, as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia assumem as formas [Burmesteier 1983, Maliska 2004]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = \frac{\sum \mathbf{F}_{vc}}{dV} \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial (e\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} e) = \frac{\dot{Q}}{dV} - \frac{\dot{W}}{dV} \quad (3.3)$$

nas quais os divergentes do lado esquerdo das equações representam os fluxos advectivos das propriedades conservadas. Na convenção adotada no presente trabalho o símbolo \mathbf{F}_{vc} representa as forças que atuam sobre o volume de controle infinitesimal² e os termos \dot{Q} e \dot{W} representam, respectivamente, o calor e o trabalho trocados com as regiões externas ao volume de controle³. As forças e o trabalho estão relacionados com o tensor de tensões, $\boldsymbol{\tau}$, e com forças de campo agindo sobre o fluido, enquanto o calor trocado com o ambiente é função dos gradientes de temperatura (lei de Fourier), conforme apresentado abaixo:

$$\frac{\sum \mathbf{F}_{vc}}{dV} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{S}_Q \quad (3.4)$$

¹ Nas análises de mecânica dos fluidos os Sistemas Termodinâmicos fechados são também conhecidos como volumes materiais [Kundu 1990].

² Observa-se que a Eq. (3.2) poderia ser escrita deixando-se indicada a operação de limite ao lado direito da equação. O mesmo poderia ser feito com a Eq. (3.4), ou seja, indicando-se a operação de limite ao lado esquerdo. Em seguida igualando-as, obtém-se a Eq. (3.8). A forma como aqui apresentado apenas não indica a operação de limite realizada, pois é imaterial, já que o termo contendo as forças desaparece quando as equações são igualadas. O mesmo procedimento é feito com a equação da energia.

³ A convenção adotada acima para os sinais de calor e trabalho segue as convenções geralmente adotadas na termodinâmica, aonde o Calor recebido pelo sistema assume valor positivo, enquanto o trabalho exercido pelo mesmo assume valores negativos [BEJAN 1988].

$$\frac{\dot{W}}{dV} = -\nabla \cdot (\mathbf{U} \cdot \boldsymbol{\tau}) + \mathbf{S}_Q \cdot \mathbf{U} + S_E \quad (3.5)$$

$$\frac{\dot{Q}}{dV} = \nabla \cdot (k \nabla T) \quad (3.6)$$

de maneira que as equações de conservação de quantidade de movimento e energia assumem a forma:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{S}_Q \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial(e\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e \mathbf{U}) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \nabla \cdot (\mathbf{U} \cdot \boldsymbol{\tau}) + \mathbf{S}_Q \cdot \mathbf{U} + S_E \quad (3.8)$$

O tensor de tensões apresentado nas equações acima está relacionado com a pressão e as taxas de deformação do fluido por meio das equações constitutivas, que para fluidos Newtonianos podem ser expressas pela equação [Papanastasiou 1999] :

$$\boldsymbol{\tau} = -P\boldsymbol{\delta} + \mu \left(\nabla \otimes \mathbf{U} + (\nabla \otimes \mathbf{U})^T - \frac{2}{3} \boldsymbol{\delta} \nabla \cdot \mathbf{U} \right) \quad (3.9)$$

A substituição da equação acima na equação 3.7 dá origem às equações de Navier Stokes.

A energia por unidade de massa, e , utilizada na equação 3.8 envolve tanto a energia interna do fluido como a sua energia cinética (ou mecânica), relacionadas pela equação:

$$e = i + \frac{|\mathbf{U}|^2}{2} = i + K \quad (3.10)$$

A equação acima pode ser substituída na equação 3.8, permitindo que a equação de conservação de energia seja escrita em termos da energia interna do fluido, apresentada a seguir:

$$\frac{\partial(\rho i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} i) = \nabla \cdot (k \nabla T) + p \cdot \nabla \otimes \mathbf{U} + \boldsymbol{\tau}^* : \nabla \otimes \mathbf{U} + S_E \quad (3.11)$$

na qual $\boldsymbol{\tau}^*$ representa a parcela do tensor de tensões associada às forças viscosas (termo entre parênteses da equação 3.8).

Na equação 3.11 o penúltimo termo está associado à dissipação viscosa, enquanto o termo que envolve a pressão representa a parcela de energia envolvida na compressão ou expansão do fluido [Kundu 1990].

A energia interna apresentada na equação 3.11 pode ainda ser relacionada com a temperatura do material pela relação entre a energia interna e a entalpia, apresentada na equação 3.12, e a relação da última com a temperatura [Bejan 1988], equação 3.13:

$$h = i + \frac{p}{\rho} \quad (3.12)$$

$$dh = c_p dT + \frac{1}{\rho} \left[1 + \frac{T}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \right] dP \quad (3.13)$$

Além das equações apresentadas acima, é necessário introduzir uma equação de conservação adicional, associada ao transporte de uma variável passiva⁴ ao longo do domínio. Esta equação pode ser escrita na forma.

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \phi \mathbf{U}) = \nabla \cdot (\rho D_\phi \nabla \phi) + S_\phi \quad (3.14)$$

na qual ϕ representa a variável passiva considerada, o termo envolvendo o divergente no lado esquerdo da equação representa o fluxo advectivo da propriedade e o termo envolvendo o gradiente no lado direito representa o fluxo difusivo da mesma. A derivação das equações de conservação já visando sua solução numérica que usufrui de um método de volumes finitos pode ser vista em [Maliska 2004].

3.2 Obtenção das equações Aproximadas

As equações apresentadas na seção anterior são comuns a todas as metodologias de mecânica dos fluidos computacional. A discretização ou aproximação destas equações para criação do modelo computacional é que caracteriza as diferentes metodologias numéricas.

A seguir será ilustrado o processo de obtenção das equações aproximadas de acordo com o método dos volumes finitos baseados em elementos, que representa a modelagem utilizada pelo software ANSYS CFX.

3.2.1 Método dos Volumes Finitos baseados em Elementos (EbFVM)

O primeiro passo na obtenção das equações aproximadas consiste na identificação dos volumes de controle que serão utilizados para caracterizar o balanço das equações de conservação em nível discreto.

⁴ As variáveis passivas representam componentes diluídos no escoamento principal, e cuja influência no escoamento pode ser desprezada. Como exemplo pode-se mencionar os traçadores utilizados nos experimentos de obtenção das curvas DTR.

No método EbFVM, os volumes de controle são criados a partir dos elementos da malha, porém o centro dos volumes está associado aos vértices, e não aos centróides dos elementos. As duas alternativas dão origem aos métodos cell-vertex e cell-center, sendo que o método utilizado pela ferramenta Ansys CFX corresponde, portanto, ao método cell-vertex.

As arestas que compõe as faces dos volumes são formadas pela união do centróide dos elementos com o centro das suas faces, como ilustrado no exemplo bidimensional abaixo:

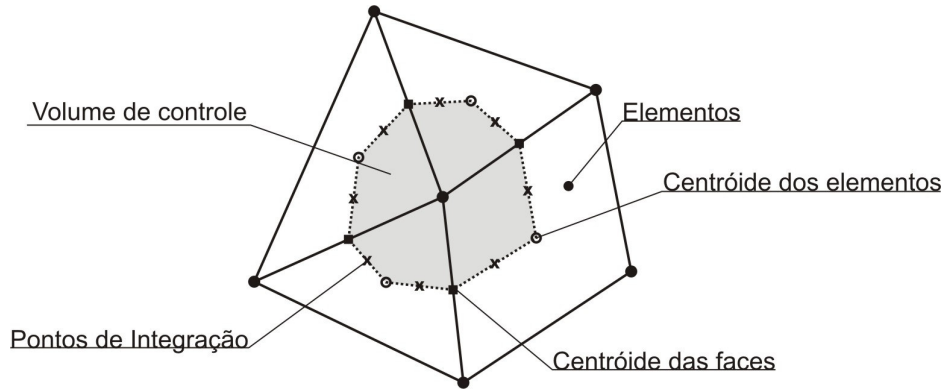


Figura 3.1- Processo de obtenção dos volumes de controle no método EbFVM e posicionamento dos pontos de integração.

O próximo passo para determinação das equações aproximadas consiste na integração das equações de conservação no volume de controle apresentado acima.

As equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e variáveis passivas para um volume de controle genérico assumem, respectivamente, a forma das equações 3.15, 3.16, 3.17 e 3.18 [Ansys CFX 2006]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{VC} \rho dV + \int_A \rho(\mathbf{U} \cdot \mathbf{n}) dA = 0 \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{VC} \rho \mathbf{U} dV + \int_A \mathbf{U} \rho(\mathbf{U} \cdot \mathbf{n}) dA = - \int_A \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n} dA + \int_{VC} \mathbf{S}_Q dV \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{VC} \rho i dV + \int_A \rho i(\mathbf{U} \cdot \mathbf{n}) dA = \int_A \lambda(\nabla T \cdot \mathbf{n}) dA + \int_{VC} (\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{U}) dV + \int_{VC} S_E dV \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{VC} \rho \phi dV = \int_A \rho D_\phi (\nabla \phi \cdot \mathbf{n}) dA - \int_A \rho \phi(\mathbf{U} \cdot \mathbf{n}) dA + \int_{VC} S_\phi dV \quad (3.18)$$

É importante ressaltar que as equações acima ainda não apresentam nenhuma simplificação em relação às equações de conservação originais e, como consequência, a solução das mesmas forneceria a solução exata do problema para todo volume de controle arbitrário.

Entretanto estas equações não podem ser resolvidas de maneira analítica, o que exige que as integrais e derivadas sejam aproximadas, isto é, calculadas de maneira discreta, introduzindo assim as primeiras (e mais importantes) aproximações no método dos volumes finitos.

Nesta operação, as integrais volumétricas são descritas em função do valor médio da propriedade no interior do volume de controle e as integrais de superfície são aproximadas pelo somatório ao longo das faces do volume (associadas aos pontos de integração P_i). Estes somatórios representam fluxos difusivos e advectivos através das fronteiras do volume de controle, e exigem informações sobre o escoamento nas faces do mesmo, enquanto as variáveis do problema estão armazenadas nos vértices da malha (valores nodais).

Para contornar este problema, funções de interpolação são definidas para que os valores associados aos pontos de integração possam ser obtidos a partir dos valores nodais. É importante perceber que a utilização de funções de interpolação exatas faria com que a solução exata do problema fosse mais uma vez encontrada para o volume de controle analisado. No entanto estas funções representariam a solução do próprio problema que se deseja resolver, e por isso só estão disponíveis para uma pequena classe de problemas, nas quais a solução analítica é conhecida [Maliska 2004].

Assim funções de interpolação aproximadas precisam ser criadas, dando origem às principais fontes de erros numéricos associados ao método dos volumes finitos [Maliska 2004]. A ordem de grandeza desses erros está associada ao tipo de função de interpolação escolhida para o problema e ao refino da malha empregado [Maliska 2004]. É importante, que as funções de interpolação sejam escolhidas de maneira a reduzir a ordem de grandeza dos erros, contribuindo, assim, para a utilização de malhas grosseiras nas análises multi-fidelidade.

3.2.2 Funções de Interpolação Espaciais

As funções de interpolação são criadas para representar termos difusivos e advectivos nos pontos de integração a partir dos valores armazenados no centro dos volumes de controle (valores nodais). As funções associadas aos termos difusivos procuram representar o gradiente das propriedades nos pontos de integração, enquanto as funções associadas aos termos advectivos representam os valores das mesmas.

Várias funções de interpolação apresentam uma formulação única para representar tanto os termos difusivos quanto os termos advectivos como , por exemplo, o método das diferenças centrais (CDS) e o QUICK , Ferziger e Peric (1997). Em outras situações, como na ferramenta Ansys CFX, as funções de interpolação para os termos difusivos e advectivos são tratadas separadamente, tendo em vista a sua importância para a estabilidade e acurácia do método numérico, como apresentado a seguir.

As funções de interpolação para os termos difusivos não apresentam problemas de estabilidade para o método numérico [Maliska 2004]. Diante disso, podem empregar esquemas simplificados, baseados na interpolação linear dos valores nodais. No método EbFMV esta interpolação utiliza o método das diferenças centrais, criado com auxílio das funções de forma, provenientes do método dos elementos finitos [ANSYS CFX 2006].

De maneira semelhante, funções de interpolação precisam ser criadas para representar os fluxos advectivos através das faces do volume de controle. Estes fluxos dependem dos valores da variável no ponto de integração, que devem, portanto, ser determinados a partir dos valores nodais.

Embora esquemas baseados na interpolação linear dos valores nodais também pudessem ser aplicados, a aproximação não é adequada para problemas fortemente advectivos [Maliska 2004] e, por isso, uma função de interpolação que é função do próprio escoamento deve ser adotada.

Para ilustrar o processo de obtenção destas funções será considerado o elemento bidimensional representado na figura abaixo.

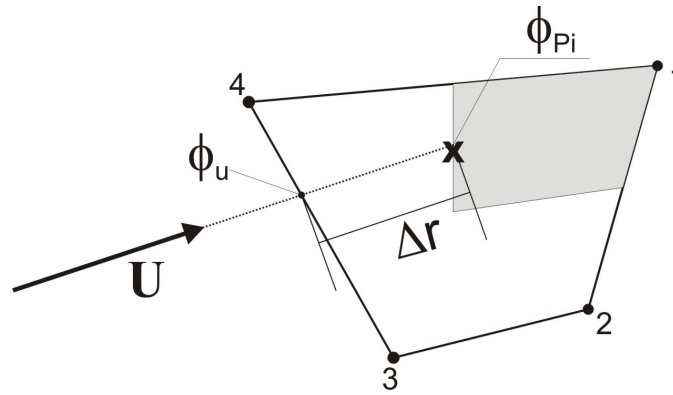


Figura 3.2- Determinação do valor da propriedade num ponto de integração para um problema fortemente advectivo.

O valor da propriedade no ponto de integração ϕ_{Pi} é, neste caso, descrito em função do valor da propriedade numa posição a montante do escoamento, ϕ_u , e do gradiente da função na direção da velocidade [Maliska 2004, ANSYS CFX 2006]:

$$\phi_{Pi} \approx \phi_u + \beta \frac{\partial \phi}{\partial r} \cdot \Delta r \quad (3.19)$$

na qual r representa a direção do escoamento, e β uma variável adimensional que permitirá a obtenção de diferentes esquemas de interpolação.

Para valores de β iguais a zero obtém-se o esquema de interpolação conhecido como *Upwind*, fazendo com que o valor da função no ponto de integração ϕ_{Pi} seja tomado como o

valor da variável numa posição à montante do escoamento⁵, ϕ_U . Apesar deste esquema de interpolação apresentar uma boa estabilidade numérica, o fato da derivada na direção do vetor velocidade estar sendo desconsiderada introduz erros de truncamento significativos. Como estes erros estão associadas a um gradiente da propriedade, elas são muitas vezes identificadas como uma falsa difusão, ou difusão numérica [Maliska 2004].

Para reduzir os erros envolvidos nesta aproximação, a função de interpolação escolhida para representar o termo advectivo no presente trabalho considera valores de β diferentes de zero. Neste caso a derivada da variável ϕ na direção da velocidade está sendo considerada, caracterizando uma função de interpolação de alta ordem.

A derivada na direção do vetor velocidade é obtida por meio de uma versão simplificada da equação diferencial sendo resolvida no problema. Para a variável genérica ϕ , a função de interpolação seria obtida pela equação 3.14, reescrita na forma [Tascflow 2002]:

$$\frac{\partial \phi}{\partial r} = \frac{1}{\rho U} [\nabla (\rho D_\phi \nabla \phi) + S_\phi] \quad (3.20)$$

A função de interpolação, neste caso, é conhecida como função de interpolação completa (FIC) [Maliska 2004]. Embora apresente soluções mais acuradas do que o esquema *Upwind*, a utilização de funções de interpolação de alta ordem pode dar origem a oscilações numéricas em regiões de fortes gradientes, como destacado por Maliksa [2004].

Para evitar a presença de oscilações numéricas, o valor de β na equação 3.19 é calculado de maneira que o valor da propriedade no ponto de integração, ϕ_{Pi} , não ultrapasse os valores máximos e mínimos observados nos vértices vizinhos ao mesmo, como descrito em Barth e Jespersen (1989). Essa restrição reduz consideravelmente os problemas de oscilação numérica observados neste esquema de interpolação, garantindo robustez e acuracidade ao modelo.

Esta função de interpolação é identificada como *High Resolution* no software Ansys CFX e, como apresentado acima, permite a redução da ordem de grandeza dos erros de truncamento envolvidos nos esquemas *Upwind* e ao mesmo tempo procura evitar os problemas de oscilação numérica característicos aos esquemas de interpolação de alta ordem. Assim, o papel deste coeficiente é transformar a aproximação em uma de baixa ordem quando grandes gradientes são encontrados e de alta ordem em outras regiões.

Para ilustrar os conceitos apresentados acima, considere o escoamento com perfil de velocidades uniforme ilustrado na Figura 3.3. O escoamento transporta uma variável

⁵ O valor de ϕ_U é calculado por meio da interpolação dos valores nodais posicionados à montante da face que contém o ponto de integração, ponderados pelos respectivos fluxos de massa. Uma descrição detalhada desta interpolação pode ser encontrada em Schneider e Raw (1986).

genérica ϕ , cujo perfil ao longo da direção x é representado por um degrau, também ilustrado na figura.

O escoamento adentra um domínio discretizado por malhas uniformemente espaçadas, com 10x10 e 100x100 elementos. As malhas foram geradas de maneira oblíqua ao escoamento para acentuar os erros de truncamento associados às funções de interpolação aproximadas dos termos advectivos.

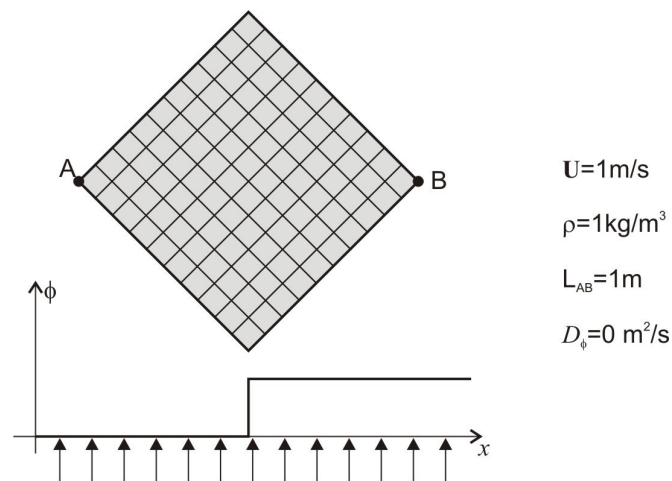


Figura 3.3-Problema utilizado para representar os problemas de oscilação e difusão numérica originados pelas funções de interpolação dos termos advectivos [Patankar 1980].

O problema foi resolvido na ferramenta CFX com o campo de velocidades prescrito no domínio, sem modelos de turbulência e desconsiderando a difusividade molecular de ϕ , ou seja, considerando apenas o transporte advectivo da variável. Soluções são obtidas para as diferentes funções de interpolação Upwind, High Resolution, e alta-ordem (com a prescrição de $\beta = 1$) nas malhas com 10x10 e 100x100 elementos.

Os valores da variável ϕ são então avaliados ao longo da linha A, B e comparados com a solução analítica, como ilustrado nas figuras abaixo.

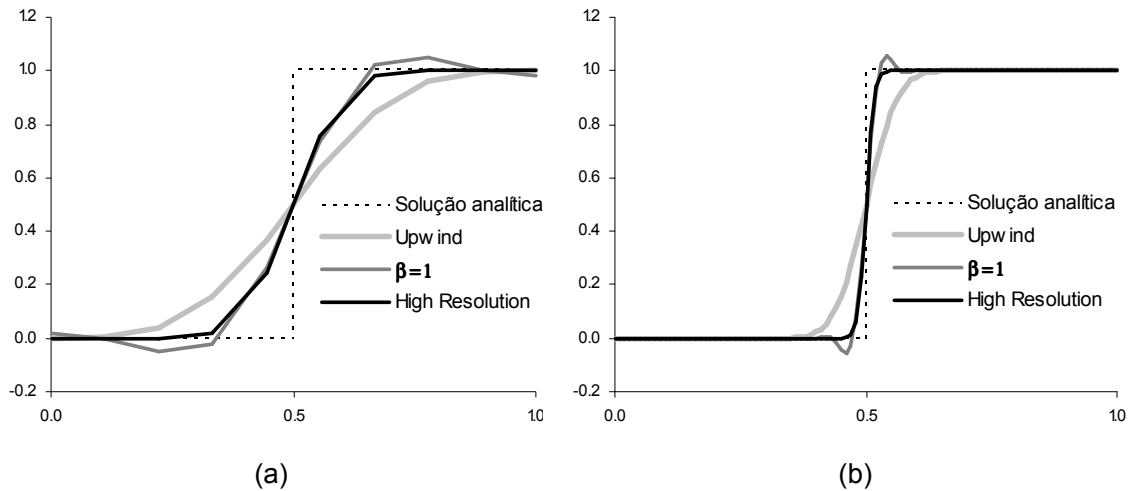


Figura 3.4- Resultados obtidos com as diferentes funções de interpolação nas malhas de 10x10(a) e 100x100(b) elementos.

Para todos os esquemas observa-se a suavização do gradiente apresentado na solução analítica. Para os esquemas de interpolação *Upwind*, entretanto, esse efeito é maximizado, em função da alta difusividade numérica associada ao modelo.

O esquema de alta ordem com $\beta = 1$ apresenta oscilações numéricas no perfil da variável ϕ , e dá origem a valores fora dos limites máximos e mínimos observados nas condições de contorno do problema. O esquema *High Resolution* apresenta a melhor relação custo benefício, minimiza os efeitos da difusão numérica e reduz consideravelmente as amplitudes das oscilações numéricas⁶. Daoud (2006) comparou os esquemas *Upwind* e *High Resolution* para o escoamento no interior do distribuidor e confirmou a melhor precisão do modelo *High Resolution*.

Ao reduzir a ordem de grandeza dos erros de truncamento este esquema contribui para que as soluções obtidas em malhas grosseiras apresentem resultados mais acurados do que os obtidos com o esquema *Upwind*. Em vista disso, o esquema *High Resolution* foi selecionado para as análises multi-fidelidade realizadas no presente trabalho.

3.2.3 Termos Transientes

Da mesma maneira como as funções de interpolação foram criadas para representar os fluxos difusivos e advectivos das equações de conservação, aproximações devem ser

⁶ O esquema *High Resolution* não elimina completamente as oscilações numéricas, porém as reduzem consideravelmente. No exemplo ilustrado acima as amplitudes das oscilações observadas com o *High Resolution* são menores em até 02 ordens de grandeza do que as observadas no esquema de interpolação com $\beta = 1$.

criadas para os termos transientes, para que eles possam ser calculados de maneira discreta.

A aproximação mais simples consiste numa interpolação de primeira ordem, na qual o valor da derivada temporal é associado aos valores da propriedade no instante atual, ϕ , e no passo de tempo anterior, ϕ^0 [ANSYS CFX 2006]:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} \approx \frac{\phi - \phi^0}{\Delta t} \quad (3.21)$$

Apesar de apresentarem uma boa estabilidade numérica, estas aproximações são altamente difusivas, e podem exigir passos de tempo muito pequenos para representar de maneira adequada as variações temporais das propriedades⁷ [CFX 2006].

Como a apreciação das curvas DTR do distribuidor está associada a longas análises transientes, a utilização de passos de tempo pequenos acarretaria em um número maior de iterações, aumentando o tempo total de processamento. Para utilizar passos de tempo maiores, e ao mesmo tempo não comprometer a qualidade das análises transientes, uma aproximação de alta ordem deve ser utilizada.

A ferramenta Ansys CFX disponibiliza uma aproximação de alta ordem para as derivadas temporais, que consiste em incluir um segundo termo na expansão em série de Taylor apresentada na equação 3.21.

Este termo adicional representa uma aproximação por diferenças finitas da deriva de segunda ordem da propriedade ϕ em relação ao tempo, de maneira que:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{t=t} &\approx \frac{\phi - \phi^0}{\Delta t} + \frac{\phi + \phi^{00} - 2\phi^0}{\Delta t^2} \Delta t \frac{1}{2!} \\ &\approx \frac{1}{\Delta t} \left(\frac{3}{2} \phi - 2\phi^0 + \frac{1}{2} \phi^{00} \right) \end{aligned} \quad (3.22)$$

na qual ϕ^{00} representa a solução obtida na penúltima iteração.

A equação 3.22 é conhecida como aproximação de segunda ordem de Euler, e reduz a ordem de grandeza dos erros de truncamento associada aos termos transientes das equações de conservação. Como consequência, passos de tempo maiores podem ser empregados nas análises transientes sem prejudicar a qualidade dos resultados, o que reduz o número de iterações e o tempo total de execução das análises.

Deve-se destacar, entretanto, que por representar uma aproximação de alta-ordem, a equação 3.22 pode causar o mesmo problema de oscilação numérica observado nas funções de interpolação espaciais com $\beta = 1$. Assim o passo de tempo deve ser

⁷ A dependência da aproximação dada na equação 3.36 em relação ao passo de tempo é análoga a dependência do esquema *upwind* no refino de malha.

determinado com base em um estudo de convergência da solução em função deste parâmetro.

3.3 Modelos de Turbulência

Embora as equações de conservação apresentadas na seção 3.1 sejam capazes de descrever todas as informações a respeito do escoamento, a aplicação das mesmas na sua forma discreta impossibilita a representação de estruturas turbulentas cujas dimensões espaciais e temporais são inferiores aos refinamentos de malha e passos de tempo empregados no modelo computacional [Freire, Menut e Su 2002].

Apesar das pequenas escalas de tempo e espaço destas estruturas, elas apresentam contribuições significativas para o transporte advectivo de diversas propriedades ao longo do escoamento, devido ao grande nível de agitação associado à turbulência [Freire, Menut e Su 2002]. Negligenciar estas contribuições poderia trazer soluções pouco representativas e, por este motivo, diferentes modelos são empregados para representar os fenômenos associados à turbulência.

A primeira opção seria utilizar malhas e passos de tempo refinados o suficiente para capturar as menores escalas turbulentas presentes no escoamento. Esta abordagem é conhecida como Simulação Numérica Direta (*DNS*). Na prática ela é pouco utilizada, pois a representação das menores estruturas turbulentas poderia implicar na utilização de malhas excessivamente refinadas, associadas a passos de tempo infinitesimais, tornando as análises muito caras, ou até inviabilizando-as [Mathieu e Scott 2000].

Diferentes metodologias foram concebidas para contornar esta dificuldade, procurando modelar o escoamento turbulento com base em malhas e passos de tempo superiores aos necessários para a simulação numérica direta. A maioria dos modelos procura representar a turbulência pelo tratamento estatístico das flutuações de velocidade e outras variáveis do escoamento [Freire, Menut e Su 2002].

Estes modelos têm como origem a divisão das propriedades entre um componente médio, e um componente flutuante, associado à turbulência. No caso da velocidade:

$$\mathbf{U} = \bar{\mathbf{U}} + \tilde{\mathbf{u}} \quad (3.23)$$

na qual $\bar{\mathbf{U}}$ representa a componente média da velocidade, e $\tilde{\mathbf{u}}$ a flutuação associada à turbulência.

A decomposição acima é adotada para todas as propriedades do escoamento, e em seguida as mesmas são inseridas nas equações de conservação originais. Aplicando a média temporal sobre estas equações chega-se às equações médias de Reynolds. Para o caso da equação de conservação de quantidade de movimento:

$$\frac{\partial \rho \bar{\mathbf{U}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{\mathbf{U}} \otimes \bar{\mathbf{U}}) = -\nabla \bar{P} + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \otimes \bar{\mathbf{U}} + (\nabla \otimes \bar{\mathbf{U}})^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot \bar{\mathbf{U}} \right) - \rho \overline{\tilde{\mathbf{u}} \otimes \tilde{\mathbf{u}}} \right] + \mathbf{S}_q \quad (3.24)$$

Comparando-se a equação acima com a equação de conservação original, observa-se que a única alteração consiste no surgimento do produto diático entre as flutuações de velocidade turbulenta. A associação deste termo com o componente viscoso do tensor de tensões faz com que o produto também seja conhecido como tensor de Reynolds [Freire, Menut e Su 2002]. Esta associação confirma a informação de que as flutuações de velocidade turbulentas colaboram para o aumento do transporte das propriedades, já que o tensor de Reynolds pode ser interpretado como uma difusividade turbulenta de quantidade de movimento.

Esta associação dá origem aos modelos de turbulência baseados na hipótese de Boussinesq, que considera que o tensor de Reynolds pode ser associado aos gradientes do escoamento médio de velocidade por intermédio de uma constante de proporção, identificada como viscosidade turbulenta. A hipótese de Boussinesq foi posteriormente reformulada por Kolmogorov [Freire, Menut e Su 2002], que apresentou a forma generalizada da hipótese, mostrada abaixo:

$$-\overline{\tilde{\mathbf{u}} \otimes \tilde{\mathbf{u}}} = \mu_t (\nabla \otimes \mathbf{U} + (\nabla \otimes \mathbf{U})^T) - \frac{2}{3} \delta \tilde{K} - \mu_t \frac{2}{3} \delta \nabla \cdot \mathbf{U} \quad (3.25)$$

na qual μ_t e \tilde{K} representam respectivamente a viscosidade e energia cinética turbulenta.

Substituindo a equação anterior na equação 3.24, resulta em:

$$\frac{\partial \rho \ddot{\mathbf{U}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \ddot{\mathbf{U}} \otimes \ddot{\mathbf{U}}) = -\nabla p' + \nabla \cdot [\mu_{ef} (\nabla \otimes \ddot{\mathbf{U}} + (\nabla \otimes \ddot{\mathbf{U}})^T)] + \mathbf{S}_Q \quad (3.26)$$

na qual μ_{ef} representa uma viscosidade efetiva, dada pela soma entre a viscosidade molecular μ e a viscosidade turbulenta μ_t , e a variável p' representa uma pressão modificada, associada à pressão média do escoamento pela fórmula:

$$p' = \ddot{P} + \frac{2}{3} \tilde{K} + \mu_{ef} \frac{2}{3} \nabla U \quad (3.27)$$

De maneira análoga à relação estabelecida entre o tensor de Reynolds e a viscosidade turbulenta, relações semelhantes podem ser estabelecidas para o fluxo turbulento de escalares [ANSYS CFX 2006]:

$$-\overline{\rho \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\phi}} = D_{\phi} \nabla \ddot{\phi} \quad (3.28)$$

na qual a variável D_{ϕ} representa a difusividade turbulenta associada à variável ϕ .

No caso específico da equação de conservação da energia, a condutividade turbulenta pode ser escrita em função do número de Prandtl turbulento e da viscosidade turbulenta, de acordo com a equação abaixo:

$$k_t = \frac{\mu_t}{Pr_t} \quad (3.29)$$

O número de Prandtl turbulento é considerado constante nos modelos de turbulência, com valor igual a 0.9, o que indica uma analogia entre as transferências turbulentas de quantidade de movimento e calor [CFX 2006].

Com base na equação acima, e seguindo o mesmo procedimento utilizado para a obtenção da equação média de conservação de quantidade de movimento, as equações médias de conservação de energia, massa e variáveis adicionais, podem ser obtidas.

A forma final destas equações é apresentada abaixo:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{\mathbf{U}}) = 0 \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial (\rho \bar{i})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{\mathbf{U}} \bar{i}) = \nabla \cdot \left(k \nabla \bar{T} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \nabla \bar{i} \right) + \boldsymbol{\tau} : \nabla \otimes \bar{\mathbf{U}} + S_E \quad (3.31)$$

$$\frac{\partial \rho \bar{\phi}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{\phi} \bar{\mathbf{U}}) = \nabla \cdot (\rho D_\phi + D_\phi) \nabla \bar{\phi} + S_\phi \quad (3.32)$$

O papel dos modelos de turbulência baseados na hipótese de Boussinesq consiste, portanto, na definição das difusividades turbulentas.

3.3.1 Modelo SST

Como destacado anteriormente, o escoamento no interior do distribuidor apresenta regiões com níveis de velocidade distintos, o que deve ser levado em conta na escolha do modelo de turbulência.

Em regiões de alta velocidade as características turbulentas do escoamento são predominantes, e se propagam até regiões muito próximas à parede. Por outro lado, nas regiões de baixa velocidade as características turbulentas apresentam menos infiltração na camada limite, e os efeitos relacionados à viscosidade molecular passam a ser predominantes nesta região [Vieser, Esch e Menter 2002]. Assim o modelo de turbulência selecionado para representar o escoamento no interior do distribuidor deve ser capaz de modelar os dois fenômenos de maneira adequada.

Os modelos baseados na dissipação de energia cinética turbulenta (ε), embora representem de maneira adequada as regiões de alta velocidade, demonstram limitações na modelagem do escoamento com baixa velocidade nas regiões próximas à parede [Menter 1994]. Por este motivo estes modelos costumam apresentar restrições em relação ao refino da malha utilizada na direção normal à parede, para que os volumes de controle não sejam posicionados em regiões aonde o modelo não é válido [Vieser, Esch e Menter 2002], [Rodi e Scheurer 1986].

Uma alternativa seria utilizar modelos baseados na frequência turbulenta (ω), pois conseguem representar de maneira robusta e consistente os fenômenos relacionados à

camada limite turbulenta, tanto para regiões de alta quanto de baixa velocidade. No entanto estes modelos costumam apresentar uma grande sensibilidade à frequência turbulenta nas regiões afastadas da parede [Menter 1992].

Para contornar as dificuldades relacionadas a cada modelo, e acoplar as vantagens relacionadas aos mesmos, Menter [Menter 1994] propôs um modelo híbrido, que utiliza o modelo $k\omega$ nas regiões próximas a parede, e o modelo $k\varepsilon$ nas regiões afastadas das mesmas. A transição entre os modelos é realizada com o auxílio de uma função F_1 , que varia entre 1 nas proximidades da parede, e 0 nas regiões livres de cisalhamento (afastadas da parede). A figura abaixo ilustra o valor de F_1 para camadas limites com diferentes perfis de velocidade:

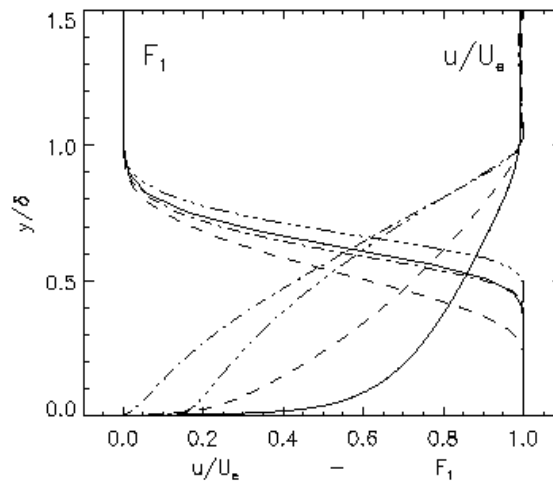


Figura 3.5- Valores da Função de transição F_1 para diferentes camadas limite. δ representa a espessura da camada limite. (Fonte: Menter 1992).

Por este motivo o modelo foi selecionado para representar o escoamento no interior do distribuidor. O equacionamento do modelo pode ser encontrado no apêndice II do presente trabalho. Outra vantagem relacionada ao modelo SST consiste na implementação de uma função de parede fisicamente consistente, isto é, que não apresenta restrições na altura do primeiro nó da malha, como apresentado a seguir.

3.3.2 Funções de Parede

Assim como os modelos de turbulência foram desenvolvidos para superar a deficiência dos recursos computacionais na simulação direta das menores escalas turbulentas, as funções de parede são introduzidas para simplificar a modelagem dos gradientes de velocidade nas regiões próximas à parede.

Para ilustrar o princípio de funcionamento destas funções, considere o perfil de velocidade ilustrado na figura abaixo, no qual y representa a distância normal à parede:

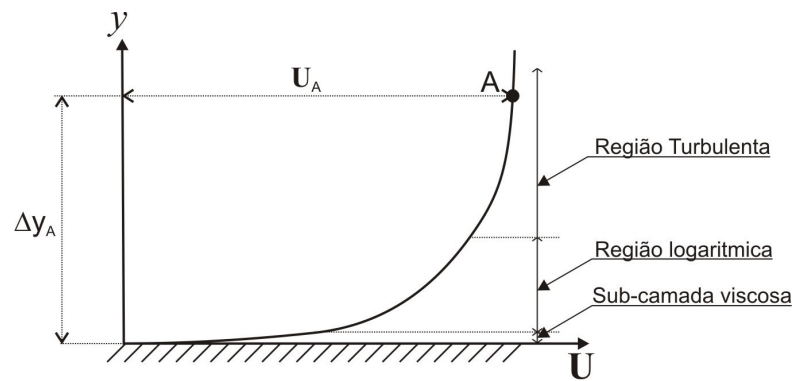


Figura 3.6-Perfil de velocidades na camada limite associado ao escoamento turbulento.

Na figura acima a camada limite foi dividida em três regiões, em função dos mecanismos governando o escoamento. Na região identificada como subcamada viscosa os efeitos da viscosidade molecular são dominantes sobre a turbulência e, como consequência, o escoamento apresenta padrões laminares [CFX 2006].

A partir da subcamada viscosa as flutuações turbulentas de velocidade passam a ter um papel decisivo nos mecanismos de transferência de quantidade de movimento e calor, identificando a região turbulenta da camada limite, que para os primeiros valores de y apresenta um perfil próximo ao logarítmico.

A modelagem do escoamento nas regiões apresentadas acima tem grande influência na determinação dos fluxos de calor e tensões de cisalhamento associadas à parede e, por isso, tem relação direta com a acurácia do modelo numérico. Duas abordagens podem ser selecionadas para representar o escoamento nestas regiões, as formulações de baixo Reynolds e as funções de parede.

As formulações de baixo Reynolds procuram representar as variações das propriedades nas regiões próximas à parede sem nenhuma simplificação, ou seja, o gradiente das variáveis é calculado pela variação linear entre o valor observado na parede e aquele calculado no primeiro nó da malha. Percebe-se, portanto, que a utilização de formulações para baixos números de Reynolds exige o uso de malhas muito refinadas na direção normal à parede. Essa exigência aumenta consideravelmente o tamanho da malha empregada caso o comprimento da camada limite seja pequeno em relação às dimensões do domínio.

Outra observação importante é que por resolverem a camada limite de maneira integral, as formulações de baixo Reynolds devem representar de maneira adequada a interação entre as difusividades moleculares e turbulentas ao longo de todas as regiões ilustradas na Figura 3.6.

Uma alternativa às formulações de baixo Reynolds seria utilizar as funções de parede. Estas funções desconsideram a subcamada limite viscosa na sua modelagem, permitindo que o primeiro nó da malha seja posicionado diretamente na região logarítmica da camada

limite. Como consequência, malhas mais grosseiras podem ser utilizadas nas direções normais à parede, contribuindo para a redução do custo computacional das análises. No entanto, por não conseguirem modelar as interações entre as viscosidades molecular e turbulentas na subcamada viscosa, estes modelos acabam impondo limites mínimos para a posição do primeiro nó da malha [Grotjans e Menter 1998].

Fica claro, portanto, que ambas as abordagens apresentam restrições em relação ao refino da malha na direção normal à parede. Estas limitações dependem não somente da distância utilizada para o posicionamento do primeiro nó, mas também do nível local de velocidades do escoamento.

Como consequência, estas abordagens tornam-se indesejadas para: i) modelar o escoamento no interior do distribuidor; ii) para serem utilizadas com as análises multi-fidelidade, pois:

- i. Os níveis de velocidade variam consideravelmente no interior do distribuidor. Como consequência, se uma única altura for aplicada para o primeiro nó da malha em todo o domínio, os vértices podem estar sendo posicionados em diferentes regiões da camada limite. Essas variações poderiam comprometer a validade tanto das formulações de baixo Reynolds, quanto das funções de parede.
- ii. Ao utilizar malhas com diferentes níveis de refino, a posição do primeiro nó da malha pode variar consideravelmente entre os modelos de alta e baixa fidelidade. Essas variações não devem comprometer a validade do modelo utilizado para representar a camada limite.

Uma alternativa seria selecionar um dos modelos acima e garantir que a altura do primeiro nó da malha seja adequada para as diferentes posições do domínio, assim como para as diferentes malhas empregadas nas análises multi-fidelidade, e para as diferentes configurações analisadas ao longo do estudo de otimização. Esta abordagem, no entanto, adicionaria grande complexidade ao processo de geração da malha.

Para contornar este problema, uma formulação híbrida é mais uma vez adotada, permitindo que a melhor formulação seja empregada em função da posição adimensional do primeiro nó da malha (y^+).

A implementação deste modelo híbrido é facilitada com o modelo SST, pois o comportamento da frequência turbulenta, ω , possui solução analítica tanto na região da subcamada viscosa quanto na região logarítmica da camada limite [Wilcox 1993] e [Menter 1994], conforme apresentado nas equações abaixo:

$$\omega_{vis} = \frac{6\mu}{\rho 0.075 y^2} \quad (3.33)$$

$$\omega_{\log} = \frac{1}{0,3\tilde{K}} \frac{u_{\tau}}{y} \quad (3.34)$$

De maneira análoga a frequência turbulenta, o perfil de velocidades pode ser descrito na região da subcamada viscosa e região logarítmica da camada limite em função da velocidade de fricção u_{τ} :

$$u_{\tau}^{visc} = \frac{U_1}{y^+} \quad (3.35)$$

$$u_{\tau}^{\log} = \frac{U_1}{\frac{1}{\tilde{K}} \ln(y^+) + C} \quad (3.36)$$

nas quais o índice 1 associado à velocidade indica que o valor está sendo considerado no primeiro ponto da malha próximo à parede.

Os valores de ω e u_{τ} obtidos com a formulação híbrida são calculados na forma:

$$u_t = \left[(u_{\tau}^{visc})^4 + (u_{\tau}^{\log})^4 \right]^{0.25} \quad (3.37)$$

$$\omega = \left[(\omega_{visc} (y^+))^2 + (\omega_{\log} (y^+))^2 \right]^{0.5} \quad (3.38)$$

na qual a posição adimensional do primeiro nó da malha em relação ao perfil de referência, y^+ , é dada por:

$$y^+ = \frac{u_{\tau} y_1 \rho}{\mu} \quad (3.39)$$

e a tensão de cisalhamento na parede pode ser calculada utilizando a equação abaixo⁸:

$$\tau_{parede} = \rho u_{\tau}^2 \quad (3.40)$$

A vantagem deste modelo é que ele permite que a melhor formulação seja utilizada em função da altura do primeiro nó da malha.

Para ilustrar a validade do modelo Vieser, Esch e Menter (2002) analisam diversos problemas empregando diferentes alturas para o primeiro nó da malha, posicionado-o desde a sub-camada viscosa até as regiões externas da camada logarítmica. A figura 3.7 ilustra o resultado obtido pelos autores para o coeficiente de atrito sobre uma placa plana ao utilizar diferentes valores de y^+ .

Deve-se destacar que a escolha pela formulação híbrida apresentada acima não está relacionada unicamente com a acuracidade do modelo, pois as outras formulações também

⁸ Uma equação semelhante pode ser obtida para o fluxo de calor próximo à parede, conforme apresentado por Vieser, Esch e Menter (2002).

são capazes de fornecer bons resultados, desde que as respectivas restrições sejam respeitadas. A escolha pelo modelo está relacionada principalmente com a sua consistência física para diferentes alturas da malha (y^+), adicionando grande flexibilidade na discretização do domínio.

Essa flexibilidade fará com que o modelo se ajuste de maneira adequada tanto para as diferentes regiões do distribuidor, como para os diferentes refinamentos de malha empregados nas análises multi-fidelidade.

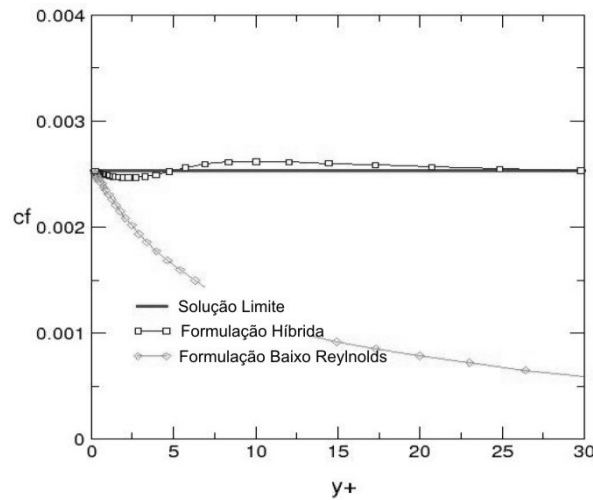


Figura 3.7 – Comparação entre os valores de coeficiente de atrito (cf) obtidos com diferentes funções de parede, para diferentes alturas do primeiro nó da malha (y^+).

3.3.3 Aproximação de Boussinesq

Para escoamentos que possuem variações de densidade pequenas e ocasionadas por variações de temperatura, a aproximação de Boussinesq pode ser aplicada para simplificar a resolução do problema.

Nesta aproximação as variações de densidade são desconsideradas em todos os termos das equações de conservação, com exceção do termo associado ao empuxo nas equações de Navier Stokes. As equações de conservação assumem, portanto, a forma:

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = 0 \quad (3.41)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_B + \underbrace{\mathbf{g} \beta \rho (T - T_{ref})}_{\text{empuxo}} + \mathbf{S}'_Q \quad (3.42)$$

$$\frac{\partial(\rho i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} i) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \boldsymbol{\tau}_B : \nabla \otimes \mathbf{U} + S_E \quad (3.43)$$

nas quais o tensor τ_b representa uma versão simplificada do tensor τ , pois o divergente da velocidade passa agora a ser nulo em função da nova representação para a equação de conservação da massa (4.58). O novo tensor assume a forma:

$$\tau_b = -P\delta + \mu(\nabla \otimes \mathbf{U} + (\nabla \otimes \mathbf{U})^T) \quad (3.44)$$

3.3.4 Modelos Lagrangeanos

Além da análise do escoamento e da obtenção das curvas DTR, uma prática comum na avaliação numérica do distribuidor consiste em analisar a trajetória de partículas representando as inclusões não metálicas.

O comportamento das inclusões no interior do distribuidor envolve fenômenos complexos de colisão, coalescência e aderência das partículas às paredes do equipamento [Sinhá e Sahai 1993], [Tozawa *et al* 1999] [Ishi *et al* 2001]. Diversos modelos foram desenvolvidos para considerar os fenômenos acima, porém os resultados obtidos são de difícil validação, devido à dificuldade de se reproduzir estes fenômenos em laboratório, ou extrair informações precisas nos equipamentos reais operando nas aciarias.

Assim, a análise da trajetória de inclusões acaba recorrendo a modelos simplificados, que desconsideram os fenômenos acima [De Kock 2005], [Daoud 2006]. Neste caso, as análises procuram descrever o comportamento de partículas cujo diâmetro é pré-definido e permanece inalterado ao longo do domínio.

O objetivo destas análises é determinar a fração de partículas que entram em contato com a escória, procurando quantificar a eficiência do processo de remoção de inclusões. Para simplificar a análise, a escória é modelada como uma parede com coeficiente de restituição nulo para as inclusões. Assim considera-se que todas as partículas que entrarem em contato com a escória serão capturadas, e a eficiência do distribuidor é determinada pela fração de partículas coletadas em função do número total injetado no domínio.

As partículas injetadas no domínio são geralmente rastreadas por uma formulação lagrangeana, que reconstrói a trajetória das inclusões por meio de uma sucessão de deslocamentos, calculados com base em um passo de tempo infinitesimal, δt , e na última posição e velocidade avaliada para a partícula ($\mathbf{x}_p^0 \ \mathbf{U}_p^0$) na forma:

$$\mathbf{x}_p = \mathbf{x}_p^0 + \mathbf{U}_p^0 \delta t \quad (3.45)$$

A nova velocidade da partícula é calculada com base na equação:

$$m_p \frac{\partial \mathbf{U}_p}{\partial t} = \sum \mathbf{F}_p \quad (3.46)$$

na qual m_p representa a massa da partícula, e \mathbf{F}_p as forças atuando sobre a mesma. As forças que agem sobre uma partícula imersa em um escoamento estão relacionadas com

diversos fenômenos, como: i) a diferença de velocidades entre a partícula e o fluido, ii) a inércia do fluido sendo deslocado pela partícula, iii) o empuxo devido à diferença de densidade iv) as flutuações de velocidade turbulenta.

Yuan e Thomas (2005) demonstraram que as principais forças atuando em inclusões não metálicas no distribuidor são as de empuxo e as originadas pelas diferenças de velocidade (arrasto). Os autores afirmam ainda que as outras forças podem ser desconsideradas em cálculos de engenharia.

Daoud (2006) analisa a influência das forças relacionadas às flutuações de turbulência na trajetória de inclusões. Nas comparações realizadas pelo autor, o número de partículas coletadas na escória aumenta consideravelmente quando estas forças são consideradas no estudo.

Deve-se lembrar, no entanto, que o modelo lagrangeano utilizado no presente trabalho já apresenta simplificações significativas, que podem fornecer resultados muito otimistas quando comparados ao problema real, tais como:

- Absorção ideal das partículas na escória: a absorção depende, na verdade, da velocidade e nível de turbulência próximos à escória, Sinhá e Sahai (1993).
- Modelar inclusões como partículas esféricas de diâmetro fixo: na prática as inclusões apresentam estruturas dendríticas, com velocidades ascendentes inferiores às calculadas na utilização de partículas esféricas, Tozawa *et al* (1999).

Por este motivo optou-se por não incluir as forças provenientes das flutuações turbulentas nos modelos lagrangeanos, já que as mesmas corroborariam para um cenário ainda mais otimista em relação ao processo de remoção de inclusões.

Com base nestas informações a equação 3.46 assume a forma:

$$m_p \frac{\partial \mathbf{U}_p}{\partial t} = \frac{1}{8} \pi \rho d_p^2 C_D |\mathbf{U}_p - \mathbf{U}| \cdot (\mathbf{U}_p - \mathbf{U}) + \frac{1}{6} \pi d_p^3 (\rho_p - \rho) \mathbf{g} \quad (3.47)$$

na qual o primeiro termo representa as forças relacionadas com a diferença de velocidades entre a partícula e o fluido (arrasto) e o segundo termo representa a força relacionada ao empuxo, que no caso das inclusões é a grande responsável pela flotação e remoção das mesmas.

A variável d_p representa o diâmetro da partícula, de maneira que as partículas de maior diâmetro apresentam maiores chances de serem capturadas pela escória, como esperado. A variável C_D representa o coeficiente de arrasto associada à partícula.

3.4 CFD aplicado ao distribuidor

Nesta seção serão apresentadas as características do modelo computacional utilizado no presente trabalho.

3.4.1 Geometria e Malha

A geometria analisada consiste em um distribuidor de dois veios, um inibidor de turbulência e duas barragens, como ilustrado na figura abaixo.

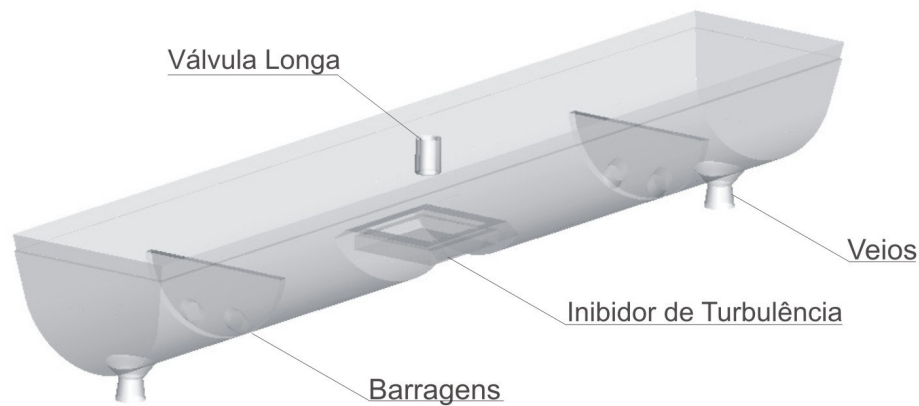


Figura 3.8 – Geometria do distribuidor analisada no presente trabalho.

Como a geometria apresenta dois planos de simetria, as análises numéricas utilizam apenas um quarto do modelo real, poupando, assim, esforços computacionais.

O modelo simplificado é ilustrado na figura abaixo, juntamente com a nomenclatura utilizada para as condições contorno.

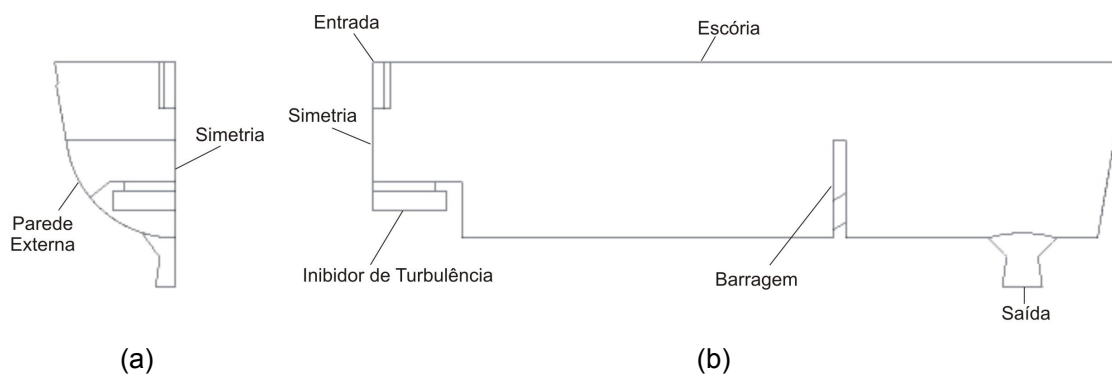


Figura 3.9 – Esquema representativo do modelo computacional e condições de contorno. Vista Frontal (a) e lateral (b).

Todas as análises realizadas no presente estudo utilizam malhas formadas por elementos hexaédricos.

A figura abaixo ilustra uma malha com aproximadamente 500 mil nós, gerada para o modelo apresentado acima. Malhas com diferentes níveis de refino também estão ilustradas no apêndice 03 do presente documento.

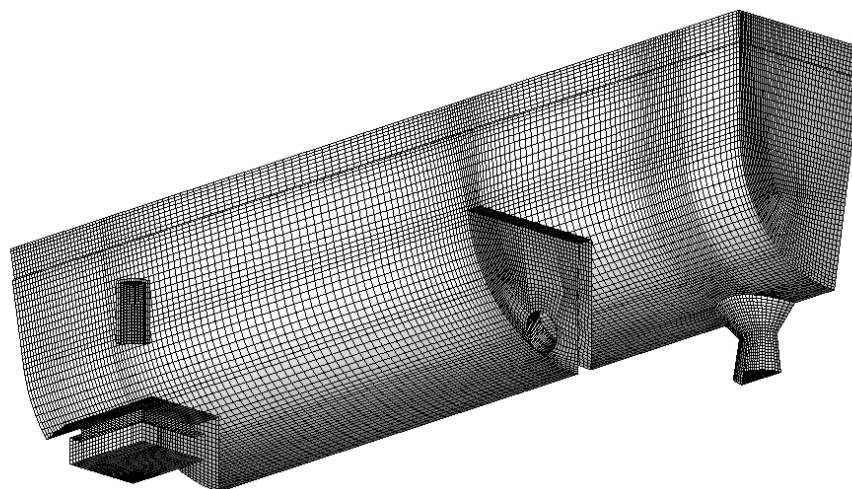


Figura 3.10 – Malha hexaédrica criada para o problema.

Antes de descrever as características restantes do modelo, deve-se lembrar que a análise completa do distribuidor envolve: i) a resolução do escoamento turbulento no seu interior, ii) a análise transiente de injeção do traçador no domínio (obtenção das curvas DTR) e iii) a análise da trajetória das inclusões. Estas etapas são também apresentadas na seção 3.4.5.

3.4.2 Propriedades dos Materiais

As análises descritas acima envolvem o escoamento de aço, a dispersão de um traçador, e a trajetória de partículas de alumina. As propriedades destes materiais são apresentadas na tabela abaixo:

Tabela 3.1-Propriedades dos materiais utilizados no presente trabalho. O símbolo X indica que a propriedade não está sendo considerada no modelo.

Propriedade	Aço	Alumina	Traçador
Densidade (kg/m ³)	7218	3960	X
Viscosidade Dinâmica (kg/m.s)	0,005	X	X
Calor Específico (J/kg.K)	750	X	X
Condutividade Térmica (W/mK)	41	X	X
Expansividade Térmica (1/K)	0,0001	X	X
Difusividade (m ² /s)	X	X	1,83e-9*
Morfologia	Fase Contínua	Partículas Sólidas	Fase Contínua

*Valor de difusividade do material utilizado como traçador nos experimentos em laboratório.

3.4.3 Condições de Contorno

A seguir, são apresentadas as condições de contorno utilizadas para a modelagem do distribuidor.

Entrada:

Na entrada a vazão de aço é prescrita como sendo igual a um quarto da vazão de operação do distribuidor, isto é, 82,5 toneladas/hora. Como resultado, um perfil de velocidade uniforme é aplicado nesta região.

A temperatura do escoamento na entrada é assumida constante e igual a 1560 °C.

Mazumdar e Guthrie(1999) indicam que o padrão do escoamento no interior do tundish é pouco influenciado pelos níveis de turbulência prescritos na entrada do domínio e, por este motivo, foram adotados valores baixos para a intensidade turbulenta e relação entre difusividade molecular e turbulenta, que assumiram valores respectivos de 1% e 1.

Nas análises transientes para obtenção das curvas de DTR, a concentração de traçador na entrada assume a forma de um pulso, com valores constantes e diferentes de zero no primeiro segundo e, em seguida, valores nulos até o final do experimento.

Nas análises Lagrangeanas as partículas são injetadas uniformemente na entrada, e assume-se que elas possuam a mesma velocidade do fluido.

Escória:

Como comentado anteriormente, a escória é modelada como uma parede sem atrito, isto é, uma parede onde a condição de não-deslizamento não é prescrita.

A perda de calor na escória é modelada como um fluxo constante de 15000 W/m², o que está condizente com os valores utilizados por De Kock (2005).

Nas análises lagrangeanas o coeficiente de restituição para as colisões das partículas na escória é nulo, indicando que todas as partículas que entrarem em contato com a mesma serão consideradas capturadas.

Paredes Externas, Inibidor de Turbulência e Barragens:

Estas condições de contorno foram modeladas como paredes, e empregam as formulações para escoamentos turbulentos apresentados nas seções anteriores.

A parede externa apresenta perda de calor para o ambiente. Esta perda é modelada por um coeficiente que representa a condutância combinada da parede de refratário e das trocas convectivas de calor na parte externa do equipamento.

Neste caso a temperatura externa foi considerada como 155 °C, e a condutividade efetiva igual a 4.36 [W/m.K], com valores, mais uma vez, condizentes aos utilizados por De Kock (2005).

As perdas de calor no inibidor de turbulência e barragens foram desprezadas.

Nas análises Lagrangeanas foram considerados coeficientes de restituição perfeitamente elásticos para as inclusões.

Saída:

A saída considera condições de escoamento localmente parabólico para todas as variáveis.

3.4.4 Características Globais

A seguir são apresentadas características globais do modelo:

- O modelo de turbulência empregado na simulação do distribuidor foi o SST, com a formulação de parede híbrida, denominada de *Automatic Near-Wall Treatment*.
- A função de interpolação utilizada para os termos advectivos foi o *High Resolution*.
- As análises do escoamento consideram as equações de conservação de massa, quantidade de movimento e energia térmica, apresentadas no início do capítulo, e com a aproximação de Boussinesq para modelar a contribuição do empuxo. A temperatura de referência para a aproximação de Boussinesq é igual à observada na entrada do domínio.
- As trajetórias das inclusões são calculadas para 4 conjuntos de partículas (5, 30, 50 e 100 μ m). Para cada um deles são injetadas 1000 partículas na entrada do domínio.
- As análises transientes para obtenção das curvas de DTR utilizam passos de tempo proporcionais ao tempo teórico de residência do distribuidor. A fração exata do tempo teórico de residência é determinada em um estudo de convergência da solução em função deste parâmetro.
- O tempo total do regime transiente analisado corresponde a 06 vezes o tempo teórico do distribuidor.
- Todas as análises foram realizadas com dupla precisão, o que reduz os erros associados à precisão numérica empregada.
- Possíveis mudanças de fase do material não são consideradas.
- A contribuição da radiação na troca de calor entre o banho de metal líquido e o ambiente externo é modelada indiretamente por meio do fluxo prescrito na escória.

3.4.5 Metodologia de Trabalho

A metodologia empregada na resolução do problema consiste, primeiramente, em atualizar a geometria do distribuidor. Com base na geometria atualizada, a malha com elementos hexaédricos é gerada e exportada para o Ansys CFX.

A primeira etapa de processamento consiste na resolução do escoamento em regime permanente no interior do distribuidor, sem considerar a trajetória das inclusões ou a injeção do traçador.

As análises Lagrangeanas desconsideram a influência das partículas sobre o escoamento, tanto do ponto de vista dinâmico quanto térmico. Por este motivo a trajetória é calculada à parte, depois que o escoamento no interior do distribuidor foi resolvido.

Da mesma maneira, as análises transientes para obtenção das curvas DTR desconsideram a influência do traçador no escoamento, sendo também resolvidas separadamente, considerando o campo de velocidades congelado, igual à solução obtida para o escoamento em regime permanente.

As etapas envolvidas na avaliação numérica do distribuidor são ilustradas no fluxograma abaixo.

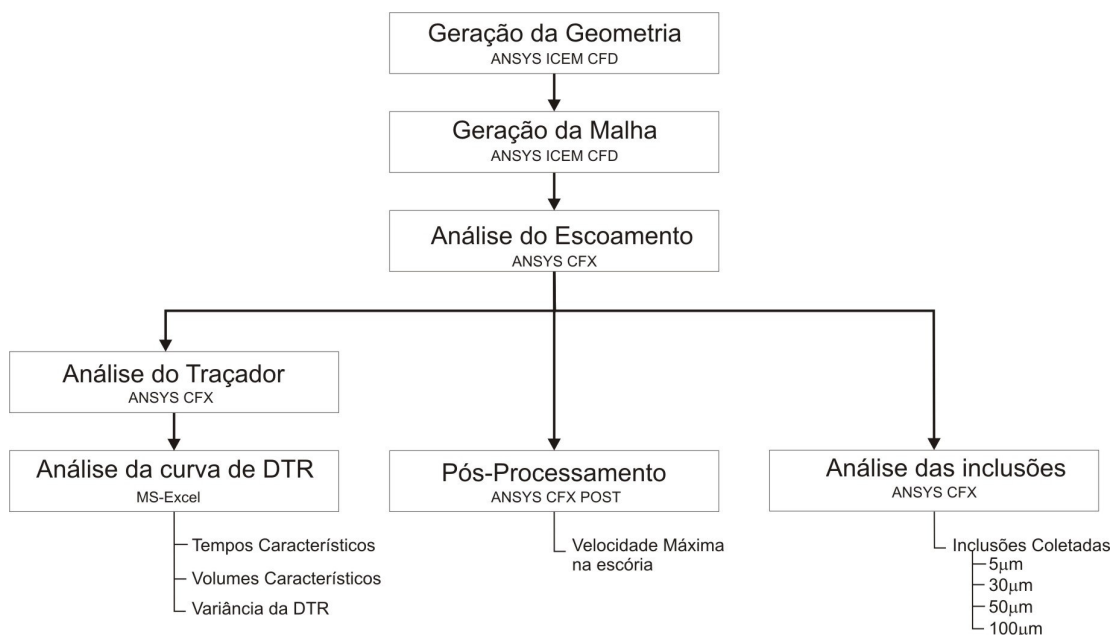


Figura 3.11- Fluxograma com as etapas desenvolvidas na avaliação do distribuidor.

Para que a avaliação do distribuidor possa ser acoplada a um algoritmo de otimização, todas as etapas ilustradas no fluxograma acima devem ser realizadas de maneira automática, isto é, sem a intervenção do usuário.

Torna-se fundamental, portanto, que as ferramentas utilizadas neste processo permitam a execução de diferentes atividades de maneira automática. A principal metodologia

utilizada por estes aplicativos consiste em interpretar arquivos contendo instruções pré-programadas, denominados de *scripts*, ou *journal files*.

3.4.6 Comparação com resultados experimentais

Para ilustrar a capacidade dos modelos computacionais na representação do escoamento no interior do distribuidor, a modelagem apresentada acima é comparada com resultados experimentais obtidos na Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP), utilizando procedimentos semelhantes aos apresentados em Silva et al (2001).

O problema analisado consiste em um modelo em escala (1:3) da configuração real apresentada na Figura 3.8. O modelo experimental utiliza água como fluido de trabalho, e a similaridade dinâmica é respeitada por meio da igualdade entre o número de Froude entre os modelos, como apresentado na equação 2.1.

O experimento consiste na injeção de um traçador no domínio na forma de um pulso com duração de 1s. A difusividade do traçador é igual à apresentada na tabela 3.1. Os resultados experimentais são, então, comparados com os resultados obtidos numericamente para dois níveis de refino de malha, com base na curva de distribuição adimensional dos tempos de residência, apresentada a seguir:

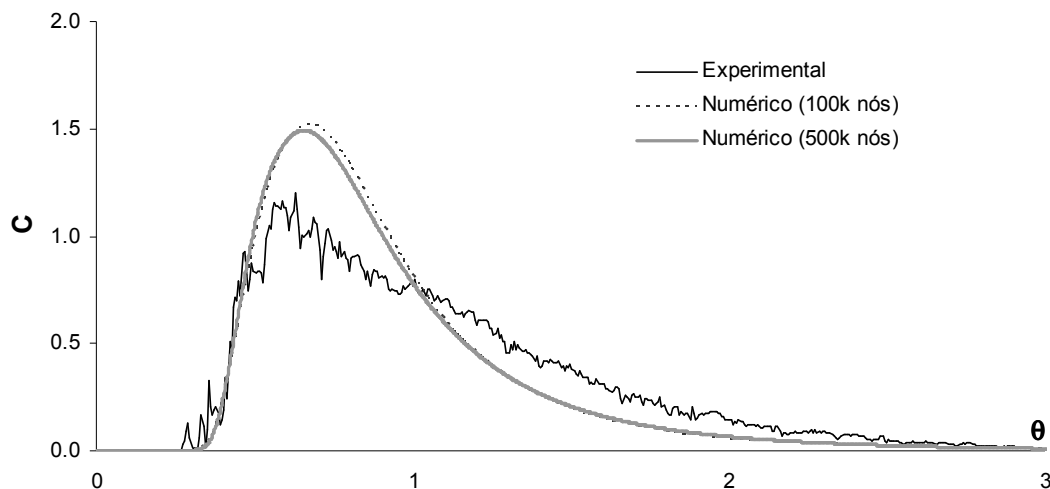


Figura 3.12- Comparação entre resultados experimentais e numéricos com diferentes refinamentos de malha.

As variações entre o modelo numérico e o experimental estão condizentes com as comparações realizadas por Daoud (2006).

É importante ressaltar que o objetivo desta comparação não é exercer uma validação criteriosa do modelo computacional, mas sim ilustrar a capacidade da análise numérica em representar adequadamente os tempos de residência no interior do distribuidor.

CAPÍTULO 04

TÉCNICAS DE OTIMIZAÇÃO

Como destacado nos capítulos anteriores, o projeto de distribuidores eficientes depende de características importantes associadas ao escoamento no seu interior. As características desejadas para o escoamento podem ser obtidas por meio de diferentes tipos de modificadores de fluxo, porém o grande número de configurações que estes dispositivos podem assumir, e a complexa interação com o escoamento dificultam a especificação dos mesmos.

A associação de algoritmos de otimização com as análises numéricas, tornam-se assim uma ferramenta com um grande potencial para auxiliar no projeto de distribuidores, permitindo a determinação de configurações otimizadas com base em um número finito de análises.

No entanto, o elevado custo computacional destas análises acaba inviabilizando a aplicação de algoritmos de otimização, pois o estudo seria pouco eficiente, com um tempo de resposta excessivamente elevado. As dificuldades são observadas não somente no projeto de distribuidores, mas também em diversas aplicações que dependem de soluções numéricas complexas, como a de escoamento de fluidos.

Para contornar estas dificuldades, estudos de otimização baseados em soluções aproximadas (*Surrogate Based Optimization*) são comumente adotados, permitindo que os algoritmos de otimização sejam aplicados em modelos simplificados, de baixo custo computacional [Alexandrov 2001]. Dentro deste contexto, duas metodologias se destacam: as soluções baseadas em meta-modelos, e aquelas baseadas em análises multi-fidelidade.

Os meta-modelos consistem em aproximações matemáticas que procuram representar a resposta de um sistema a partir da interpolação e extrapolação de um conjunto de soluções existentes. Diferentes modelos são incluídos nesta categoria, como as regressões polinomiais, Kriging, regressões por Funções de Base Radial, Redes Neurais Artificiais, entre outras.

Como destacado no início deste trabalho, as aproximações por meta-modelos apresentam importantes vantagens, como a redução do custo computacional e a suavização de possíveis ruídos associados às ferramentas numéricas. No entanto, por representarem aproximações matemáticas de fenômenos físicos complexos¹, estes modelos podem não capturar oscilações locais da solução caso o número de pontos fornecidos para a sua construção não seja adequado. A acurácia do meta-modelo depende, portanto, do problema

¹ Assume-se aqui a aplicação de meta-modelos em problemas de engenharia governados por equações físicas de difícil manuseio, como as equações de Navier Stokes.

que se deseja representar e do número de pontos utilizados na sua construção. Para garantir a acurácia, aproximações adaptativas são utilizadas, permitindo que o meta-modelo seja calibrado com base em novas soluções na medida em que se aproxima do ponto ótimo de operação. Esta metodologia garante uma boa acurácia, porém o número de análises de alta-fidelidade necessárias para a construção do meta-modelo inicial e para as adaptações futuras pode ser elevado, caso a resposta do sistema seja altamente não linear (uma informação que também não está disponível *à priori*).

Para contornar estas dificuldades uma segunda classe de soluções aproximadas é utilizada, baseadas no conceito de multi-fidelidade. Neste caso a solução de alta fidelidade é substituída por um modelo simplificado, de baixo custo computacional e menor acurácia, mas que ainda procura resolver as equações físicas associadas ao problema.

Os modelos de baixa fidelidade podem envolver uma representação física simplificada do problema original, soluções com critérios de convergência menos rígidos, utilização de malhas com diferentes níveis de refino, entre outros [Alexandrov *et al* 2001]. A falta de precisão relacionada aos modelos de baixa fidelidade é contornada, na prática, pela utilização de funções de correção, que relacionam as respostas entre os dois modelos.

As informações apresentadas acima são resumidas na tabela abaixo, para facilitar a comparação entre as diferentes metodologias existentes.

Tabela 4.1- Alternativas para estudos de otimização de distribuidores

Modelo Empregado	Custo computacional	Acurácia
Análises de Alta-Fidelidade	Alto	alta
Meta-Modelagem adaptativa	Médio	alta
Meta-modelagem	Baixo	Dependente do Problema
Análises Multi-fidelidade	Baixo	baixa, mas corrigida

Pelas vantagens apresentadas acima, a metodologia sugerida para o estudo de otimização de distribuidores apresenta como característica principal as análises multi-fidelidade.

As aproximações por meta-modelos também são utilizadas, tanto na construção das funções de correção global entre os modelos de alta e baixa-fidelidade, assim como na resolução do problema de otimização do modelo de baixa-fidelidade, o que reduz consideravelmente o número de análises fluido-dinâmicas realizadas durante o estudo.

4.1 Metodologia para estudo de otimização de distribuidores

A grande motivação para a elaboração da metodologia apresentada nesta seção foi reduzir o número e a complexidade das análises fluido-dinâmicas envolvidas em um estudo de otimização de distribuidores, mas sem prejudicar a exploração adequada do domínio de projeto².

A motivação ganhou respaldo no forte sentimento físico de que malhas grosseiras poderiam fornecer soluções adequadas para estudos qualitativos do distribuidor, que numa escala maior envolvem também os estudos de otimização. No entanto a aplicação direta de algoritmos de otimização nas malhas grosseiras gerava incertezas sobre a validade da simplificação e sobre as ações que deveriam ser tomadas caso a solução ótima fornecida pela malha grosseira não correspondesse a uma melhoria da solução na malha refinada.

Esta incerteza foi removida com a adoção das funções de correção utilizadas nas análises multi-fidelidade. As funções permitem a elaboração de uma metodologia robusta, que investe na capacidade das malhas grosseiras em representar qualitativamente o problema, mas que também permitem ajustes no modelo, caso se demonstre necessário.

As funções de correção relacionam soluções homólogas do mesmo problema e, por isso, tendem a possuir um comportamento mais suave ao longo do domínio de projeto, corroborando para a representação das mesmas por aproximações matemáticas (meta-modelos).

Outra característica importante associada à metodologia apresentada nesta seção é que as análises fluido-dinâmicas, tanto de alta quanto de baixa-fidelidade, são utilizadas apenas para a construção e atualização de meta-modelos, e não durante a aplicação dos algoritmos de otimização. Assim o número de análises de CFD pode ser controlado em função do tempo e dos recursos disponíveis para o estudo.

O fato dos algoritmos de otimização serem aplicados em meta-modelos, e não nas custosas análise de CFD também permite a utilização de algoritmos robustos, com uma boa capacidade de encontrar pontos ótimos globais, como os algoritmos genéticos.

A metodologia proposta neste trabalho é apresentada a seguir, enquanto os algoritmos de otimização e meta-modelos utilizados são apresentados na próxima seção.

² O conceito de domínio de projeto pode ser interpretado como o espaço cartesiano n -dimensional que engloba todas as possíveis soluções para um problema de otimização. Cada dimensão do espaço representa uma das variáveis de projeto, e assim um ponto neste espaço n -dimensional passa a representar uma possível solução para o problema.

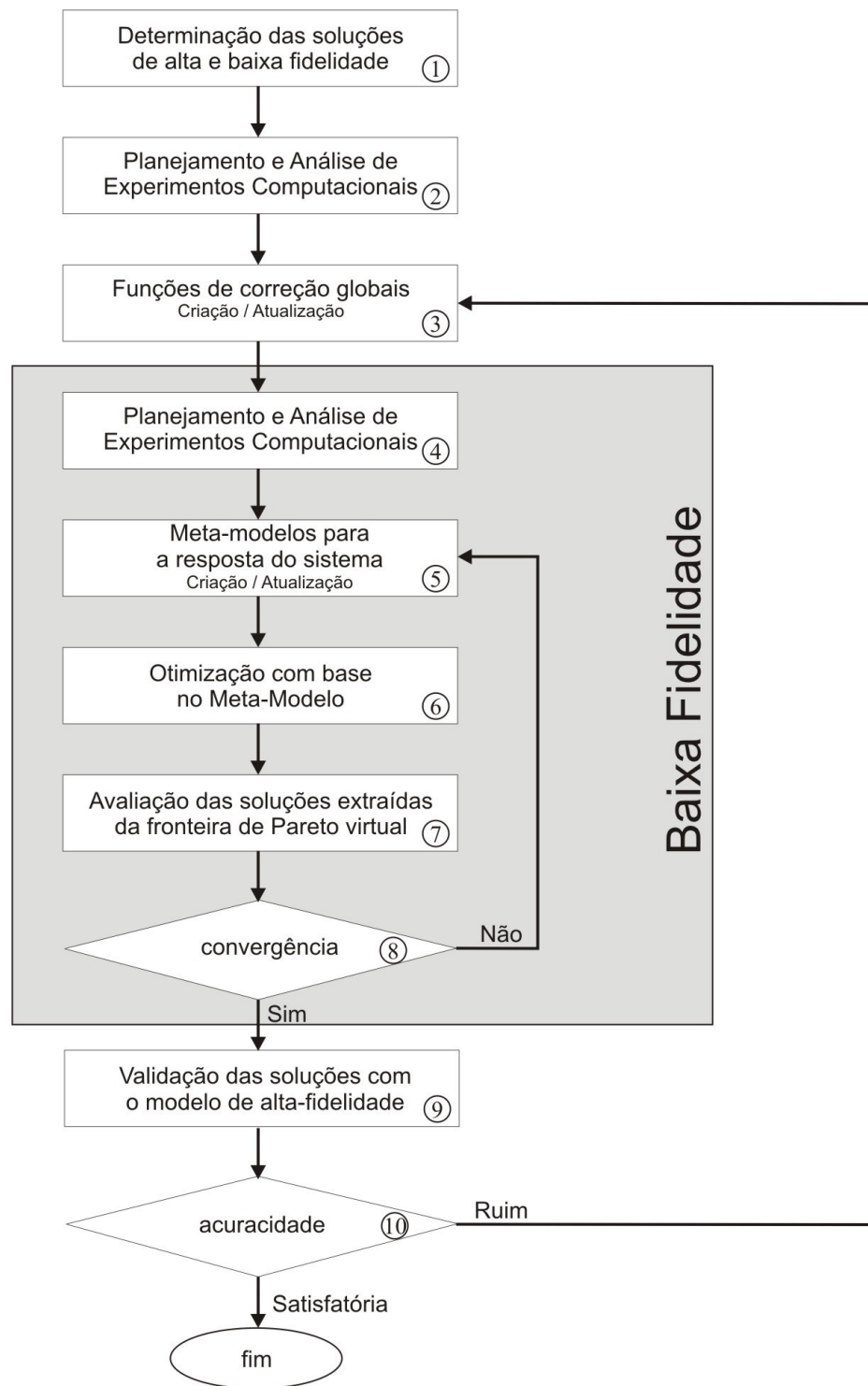


Figura 4.1 – Fluxograma com a metodologia proposta para o estudo de otimização de distribuidores.

4.1.1 Determinação das soluções de alta e baixa-fidelidade

O primeiro passo consiste em determinar os níveis de refino de malha que estarão associados às soluções de alta e baixa-fidelidade.

Alta Fidelidade:

Em algumas situações o refino de malha necessário para fornecer uma resposta adequada ao problema pode ser conhecido, seja em função da experiência adquirida em análises anteriores, ou de validações realizadas com resultados experimentais.

Caso esse refino não seja conhecido, o mesmo pode ser determinado em função de um estudo de convergência de malha, que deve levar em conta todas as funções objetivo consideradas para o problema de otimização.

Baixa Fidelidade:

O modelo de baixa-fidelidade, apesar de empregar uma malha grosseira, deve ao menos garantir uma representação geométrica adequada do equipamento. Também é importante que a discretização das seções transversais dos dutos de entrada e saída do distribuidor não seja extremamente grosseira, o que poderia prejudicar o cálculo do escoamento nesta região.

Outra observação importante é que o modelo de baixa-fidelidade não deve violar nenhuma restrição associada aos métodos numéricos utilizados para resolver o escoamento no interior do distribuidor.

4.1.2 Planejamento e Análise de Experimentos Computacionais-I

O primeiro planejamento de experimentos computacionais tem como objetivo especificar o conjunto de configurações que será utilizado para criação das funções de correção entre os modelos de alta e baixa fidelidade.

É importante destacar que as configurações selecionadas deverão ser avaliadas tanto pelos modelos de alta quanto baixa-fidelidade, e por isso esta etapa compreende uma das mais dispendiosas do ponto de vista computacional. No entanto o número de configurações utilizadas para a construção das funções de correção não é fixo, e pode ser ajustado em função do tempo e recursos disponíveis para as análises.

Num caso extremo a função de correção poderia ser considerada constante (igual a zero ou à diferença observada na configuração inicial), e assim esta etapa poderia ser omitida numa primeira iteração do ciclo apresentado na figura 4.1. Neste caso, a primeira iteração dependeria unicamente da capacidade da malha grosseira em identificar os pontos ótimos de operação. Caso as soluções encontradas pelo modelo de baixa-fidelidade não apresentem melhorias significativas, as funções de correção também podem ser corrigidas

posteriormente. A vantagem é que as configurações avaliadas até o momento não seriam perdidas, só precisariam ser atualizadas com as novas funções de correção.

A utilização de diferentes números de configurações para construção das funções de correção será avaliada no capítulo 05, o que permitirá a análise da robustez da metodologia aqui apresentada.

Em função da necessidade de se reduzir o número de configurações avaliadas nesta etapa, é importante que as mesmas sejam distribuídas adequadamente, podendo ser determinadas, por exemplo, por meio de técnicas de planejamento de experimentos computacionais, como discutido na seção 4.2. Além das funções de correção, os resultados obtidos nesta etapa também podem ser utilizados para analisar possíveis correlações entre as funções objetivo do problema. Se estas correlações forem detectadas o número de objetivos poderia ser reduzido, o que diminuiria a complexidade do problema de otimização.

4.1.3 Funções de Correção Global

Nesta etapa os meta-modelos que representam as funções de correção aditivas são construídos (ou atualizados, caso uma segunda iteração seja realizada).

As aproximações por Funções de Base Radial foram selecionadas para criação dos meta-modelos em função da sua robustez e eficiência, tanto na interpolação quanto extrapolação dos resultados. Esta metodologia será apresentada na seção 4.4.

Embora as funções de correção sejam representadas por meta-modelos, elas serão designadas apenas por funções de correção ao longo do texto, para que não sejam confundidas com os meta-modelos utilizados na representação da resposta do sistema de baixa-fidelidade.

4.1.4 Planejamento e Análise de Experimentos Computacionais-II

Como comentado anteriormente, o estudo de otimização realizado com base nas soluções de baixa-fidelidade é resolvido com auxílio de um meta-modelo adaptativo. A vantagem desta abordagem em relação à aproximação do próprio problema original é que as análises de baixa-fidelidade são relativamente rápidas, e assim um número maior de configurações pode ser utilizado na construção do meta-modelo, o que reduz as chances de comportamentos locais da solução não serem detectados.

Com um número de configurações maior, o planejamento de experimentos também pode recorrer à técnicas tradicionais e eficientes, como por exemplo o planejamento fatorial completo, apresentado na seção 4.2.

4.1.5 Representação da resposta de baixa-fidelidade por Meta-Modelos

Esta etapa consiste em criar ou atualizar os meta-modelos que irão representar a resposta do sistema de baixa-fidelidade.

É importante destacar que embora o primeiro meta-modelo seja construído com base em configurações distribuídas de maneira adequada (empregando técnicas de planejamento de experimentos), as atualizações posteriores irão utilizar pontos cuja distribuição não é conhecida. Assim é importante que metodologia utilizada para construção do meta-modelo seja robusta em relação à distribuição das configurações no domínio de projeto, como por exemplo as aproximações por funções de base radial.

Sempre que possível, a inspeção visual do meta-modelo é recomendada, pois permite a identificação rápida de possíveis problemas no modelo, assim como de resultados/pontos atípicos, que não estejam condizentes com aqueles observados nas suas vizinhanças. Caso pontos atípicos sejam identificados, os mesmos devem ser investigados para averiguar a validade do resultado, procurando identificar problemas com níveis de convergência, problemas com a qualidade da malha, etc.

4.1.6 Otimização com base no Meta-Modelo

Como destacado anteriormente, os algoritmos de otimização serão acoplados diretamente com as soluções provenientes do meta-modelo, e não com as análises fluido-dinâmicas. Essa abordagem oferece uma grande flexibilidade em relação à escolha do algoritmo de otimização utilizado no problema.

Por um lado, algoritmos baseados em gradientes poderiam ser empregados, pois o meta-modelo tende a suavizar os ruídos associados aos modelos numéricos, o que facilita o cálculo das derivadas das funções objetivo. Algoritmos com baixas taxas de convergência poderiam ser igualmente utilizados, pois as avaliações realizadas nessa etapa tomam somente alguns milésimos de segundo, o que faz com que o número de iterações realizadas deixe de ser um problema.

Por este motivo optou-se pela utilização do algoritmo genético NSGA-II, Deb *et al* (2000), que apesar da baixa taxa de convergência, apresenta um grande potencial para encontrar pontos ótimos globais. O algoritmo será apresentado na seção 4.3. Para distinguir as soluções obtidas nesta etapa daquelas obtidas pelos modelos de alta e baixa-fidelidade, as mesmas são identificadas como virtuais.

4.1.7 Avaliação das soluções extraídas da Fronteira de Pareto Virtual

Ao final da convergência do algoritmo de otimização os melhores resultados virtuais devem ser identificados, e deste conjunto um pequeno número deve ser selecionado para avaliação com o modelo de baixa-fidelidade.

O número de configurações selecionadas nesta etapa também pode ser ajustado em função dos tempos e recursos disponíveis. Neste trabalho optou-se pela seleção de uma dezena de configurações. A avaliação destas configurações irá permitir que os meta-modelos sejam atualizados nas regiões ótimas do domínio, garantindo uma melhor representação do problema nestas regiões.

É importante destacar que nem todas as soluções precisam ser utilizadas para a atualização do meta-modelo. Configurações muito próximas entre si devem ser evitadas, pois em alguns casos poderia dificultar a construção do meta-modelo, ou contribuir para fortes oscilações no mesmo, em função de possíveis ruídos numéricos na solução do problema.

4.1.8 Análise da Convergência

Os passos 5, 6 e 7 devem ser repetidos até que não se observe melhoria significativa na posição da região ótima de operação. O critério estabelecido nesta etapa é de caráter subjetivo, e assim o processo pode ser interrompido caso o esforço computacional necessário para mais uma iteração no processo não justifique os ganhos observados nas últimas iterações.

4.1.9 Validação das Soluções com o modelo de alta-fidelidade

No final do primeiro ciclo a melhor configuração encontrada deve ser avaliada pela ferramenta de alta-fidelidade. Recomenda-se que apenas uma configuração seja selecionada, o que será suficiente para verificar a acuracidade do modelo na região ótima de operação.

4.1.10 Acuracidade

A comparação entre os resultados obtidos com as soluções de alta e baixa fidelidade irá permitir que a acuracidade do modelo seja avaliada na suposta região ótima do projeto. Se necessário, as funções de correção devem ser atualizadas com o novo resultado de alta-fidelidade, e uma segunda iteração deve ser realizada no processo.

É importante destacar que as análises fluido-dinâmicas realizadas até o momento não seriam perdidas, só precisariam ser atualizadas com base na nova função de correção. Assim uma segunda iteração do processo poderia iniciar diretamente na criação dos meta-modelos para o sistema de baixa-fidelidade (passo 5).

Apesar da metodologia apresentada nesta seção não apresentar nenhuma restrição em relação às metodologias de planejamento de experimentos, algoritmos de otimização e meta-modelos, as técnicas utilizadas no presente trabalho são apresentadas nas próximas seções.

4.2 Planejamento de Experimentos Computacionais

As técnicas de planejamento de experimentos computacionais são utilizadas para garantir uma distribuição adequada de um conjunto de configurações ao longo do domínio de projeto, Box e Draper (1987). A melhor distribuição que poderia ser aplicada em um domínio de projeto regular, *i.e* sem restrições, seria a distribuição uniforme ao longo das n dimensões do domínio.

Este tipo de distribuição, conhecida como planejamento fatorial completo, além de permitir a uniformidade dos experimentos, também contribui para uma análise adequada das iterações entre as variáveis de projeto e as funções objetivo. Para ilustrar este conceito, pode-se considerar o resultado observado para esta metodologia em um domínio de projeto tridimensional:

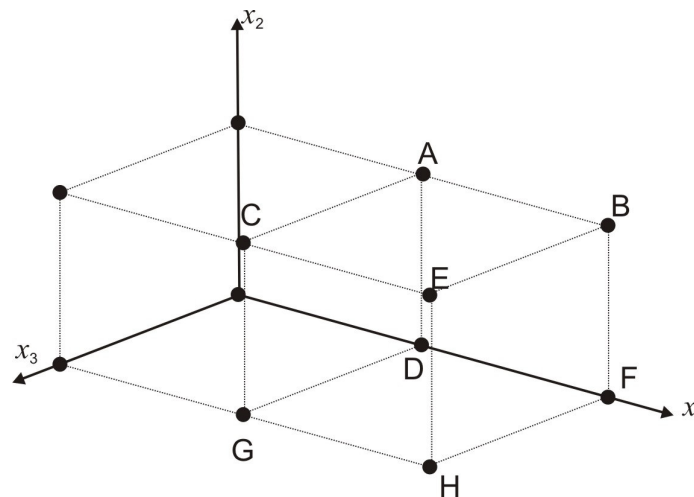


Figura 4.2- Planejamento fatorial completo num domínio de projeto tridimensional.

Na figura observa-se que as distribuições ao longo de cada variável de projeto é uniforme, porém o número de níveis de utilizados em cada direção podem ser diferentes. Observa-se ainda que ao migrar do Ponto A para os pontos B, C e D, pode-se avaliar a influência de cada uma das variáveis de projeto de maneira isolada, enquanto ao migrar do ponto A para os pontos E, F, G e H, pode-se analisar a influência combinada das variáveis.

Embora eficiente, esta metodologia exige um número de configurações proibitivo para domínios de projeto com muitas dimensões. Por este motivo outras metodologias de planejamento de experimentos foram desenvolvidas, procurando reduzir o número de análises e ainda assim recuperar o maior número possível de informações sobre o problema.

A maioria das metodologias consegue distribuir de maneira adequada um número reduzido de configurações em domínios de projeto regulares, mas apresentam limitações

quando a região viável do domínio de projeto é irregular, em função de restrições aplicadas sobre o problema.

Uma metodologia de planejamento de experimentos que vem se destacando neste tipo de aplicação consiste na utilização de algoritmos de otimização para determinar a melhor combinação possível de experimentos a partir de um conjunto de configurações fornecidas inicialmente. Estes algoritmos consideram um conjunto de configurações como parâmetros de entrada e procuram obter um subconjunto que apresente características desejáveis para um planejamento de experimentos. A seleção do subconjunto é realizada de maneira que a correlação entre os parâmetros de entrada nas configurações selecionadas seja o menor possível, o que garante que o maior número de informações seja extraído do problema.

Este é o princípio de funcionamento do planejamento de experimentos conhecido como D-Optimal na ferramenta modeFrontier [modeFrontier 2007]. Uma das vantagens deste algoritmo é que o número de configurações passa a ser um parâmetro de entrada, enquanto em outras metodologias este número não pode ser controlado diretamente, ou apresenta valores mínimos que não podem ser reduzidos (como no planejamento fatorial completo).

Outra vantagem é a sua aplicação em domínios de projeto irregulares, já que o conjunto inicial de configurações pode ser gerado randomicamente, se ajustando às restrições do problema. Neste caso o algoritmo D-Optimal determinaria o subconjunto de N configurações que apresentasse a melhor representação possível do domínio de projeto.

Na Figura 4.1 observa-se que as técnicas de planejamento de experimentos são utilizadas nos passos 2 e 4 da metodologia adotada para o presente estudo. No passo 2 recomenda-se a utilização de algoritmos semelhantes ao D-Optimal, em função do baixo número de configurações utilizadas nesta etapa, e de possíveis restrições no domínio de projeto. No passo 5, como o número de configurações avaliadas é maior, pode-se optar pelo planejamento fatorial completo, adequando o número de níveis em cada variável de entrada em função da quantidade de análises desejadas.

4.3 Algoritmos de Otimização

A escolha de um algoritmo de otimização deve levar em conta diferentes aspectos do problema que se deseja resolver, e dos recursos e tempos disponíveis para obtenção da solução. Algoritmos baseados em gradientes, por exemplo, apresentam uma boa taxa de convergência³, porém podem convergir para pontos ótimos locais, além de apresentarem uma grande sensibilidade aos ruídos numéricos associados ao modelo computacional.

³ A taxa de convergência considerada aqui representa o número de análises necessárias para se atingir a região ótima de operação do domínio.

Em muitos problemas o estudo de otimização também pode envolver mais de uma função objetivo, o que dificulta a aplicação de algoritmos baseados em gradientes, já que a direção de crescimento nem sempre pode ser determinada.

Os algoritmos genéticos, por outro lado, são associados à uma baixa taxa de convergência, porém apresentam grande robustez, no sentido de convergirem para pontos ótimos globais, além de serem adequados para problemas com múltiplas funções objetivo. Por estes motivos os algoritmos genéticos foram selecionados para o presente trabalho.

4.3.1 Algoritmos genéticos

Os algoritmos genéticos representam a classe de metodologias inspiradas nos princípios de seleção e evolução natural, e que utilizam operações baseadas em transformações genéticas, como o cross-over e a mutação [Goldberg 1989], [Coley 1999]. O princípio de funcionamento destes algoritmos consiste em identificar as diferentes configurações por uma seqüência de números binários, que representam o material genético utilizado pelas operações de cross-over e mutação. A decodificação das configurações em seqüências de números binários exige que as variáveis de entrada sejam tratadas de maneira discreta, e operem entre valores mínimos e máximos pré-estabelecidos.

Como exemplo, considere um problema com duas variáveis de entrada, x_1 e x_2 , tais que $0 \leq x_1 \leq 5$ e $30 \leq x_2 \leq 40$. Assumindo que a variável x_1 represente uma variável inteira, e que a variável x_2 represente uma variável real, com resolução⁴ de 0.1, então a configuração determinada pelas duas variáveis pode ser especificada com base em uma seqüência de 10 números binários, como ilustrado na figura abaixo:

0	0	1	0	1	0	0	1	0	1
x_1				x_2					

Figura 4.3-Exemplo de decodificação binária.

Os três primeiros números utilizados na seqüência são utilizados para representar os 6 valores que a variável x_1 pode assumir⁵, enquanto os 7 restantes representam os 101 possíveis valores relacionados à variável x_2 .

⁴ Algumas implementações de algoritmos genéticos já utilizam a decodificação de números reais, não exigindo portanto a especificação de uma resolução para especificar os valores intermediários entre os limites inferiores e superiores da variável. Ver [modeFrontier 2007].

⁵ O tamanho da seqüência de números binários associado à uma variável (n) é função do número de valores que a mesma poderá assumir (p), e deve respeitar a relação $2^n \geq P$.

Os valores reais das variáveis podem ser recuperados pela equação:

$$x_i = x_i^{\min} + \frac{x_i^{\max} - x_i^{\min}}{n_i + 1} \sum_{k=0}^{q_i} 2^k b_k \quad (4.1)$$

na qual x_i^{\max} e x_i^{\min} representam os valores mínimos e máximos que as variáveis x_1 e x_2 podem assumir, enquanto n_i representa o número de valores intermediários associados as variáveis, e q_i representa a extensão da seqüência de números binários utilizados para cada variável (neste caso 3 e 7).

Com a decodificação cada configuração passa a ser tratada como um indivíduo, o qual é caracterizado pela sua seqüência de números binários, ou material genético. O ponto de partida destes algoritmos consiste na especificação de um conjunto inicial de indivíduos, identificados como população inicial, ou primeira geração. Cada indivíduo desta população é avaliado, e aqueles que apresentarem os melhores valores das funções objetivo têm mais chance de serem selecionados para a formação de uma nova geração, enquanto a probabilidade de seleção dos indivíduos com menor desempenho é mais baixa. Esta etapa representa o princípio da seleção natural.

O princípio de evolução está relacionado às operações genéticas utilizadas para a formação da nova geração, que consistem no cross-over e na mutação. A operação de cross-over tem um princípio análogo ao observado na biologia. Nesta operação dois indivíduos da geração atual são selecionados (com base no seu desempenho), e o material genético associado a cada indivíduo é trocado a partir de uma posição sorteada pelo algoritmo, como ilustrado na figura abaixo:

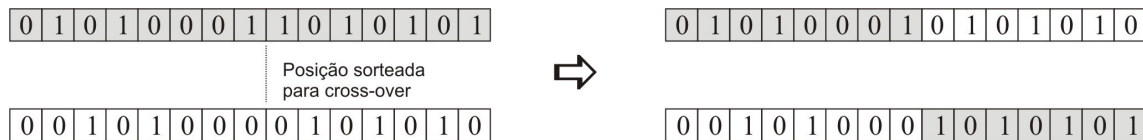


Figura 4.4-Operação de Cross-over.

Na figura acima observa-se que algumas posições da seqüência de números binários são iguais para os dois indivíduos, e portanto não poderiam ser alteradas com a operação de cross-over. Caso observado em toda a população inicial, este problema poderia restringir o algoritmo à regiões específicas do domínio de projeto. Para contornar esta dificuldade, e diversificar a região de busca, o operador de mutação é introduzido, permitindo que valores na seqüência de números binários sejam alteradas randomicamente, de acordo com uma probabilidade pré-estabelecida. Caso a modificação seja eficiente, a nova configuração terá mais chances de ser selecionada para a formação das gerações futuras, caso contrário, será provavelmente descartada nos primeiros processos de seleção.

As operações de cross-over e mutação garantem uma busca eficiente do domínio de projeto, e aumentam consideravelmente as chances de que a solução convirja para um ponto ótimo global e não local. Além dos operadores apresentados acima, os algoritmos genéticos também costumam empregar o conceito de elitismo. Este conceito indica que as melhores configurações observadas na população atual serão copiadas para a geração futura.

Zitler, Deb e Theile (2000) demonstraram que a inclusão do elitismo auxilia consideravelmente na convergência dos algoritmos genéticos.

4.3.2 NSGA-II

O algoritmo NSGA-II, proposto por Deb *et al* (2000) possui as mesmas funcionalidades básicas de um algoritmo genético apresentadas na seção anterior. A particularidade do método reside na maneira como o elitismo é implementado, e na seleção dos indivíduos para formação da nova geração.

Estas duas operações recorrem ao conceito de dominância de Pareto, que indica que uma solução A é dominada por uma solução B se todos os objetivos são aperfeiçoados ou mantidos constantes ao migrar de A para B, devendo ao menos um objetivo ser aperfeiçoado [Rao 1996]. O conjunto de soluções não-dominadas dá origem à fronteira de Pareto, ilustrada na figura abaixo.

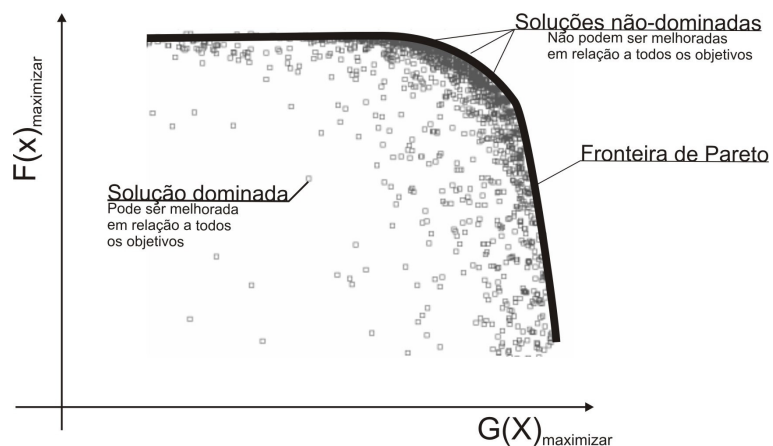


Figura 4.5- Ilustração do Conceito de dominância de Pareto para um problema com duas funções objetivo a serem maximizadas $F(x)$ e $G(x)$.

Elitismo:

O elitismo implementado no NSGA-II consiste em manter um histórico com as melhores soluções não dominadas encontradas até o momento. A cada iteração este histórico é combinado com a última população avaliada, e os resultados são então ordenados em função do conceito de dominância de Pareto. Nesta ordenação as soluções não-dominadas

são colocadas nas primeiras posições, enquanto as restantes são classificadas pelo número de configurações que as dominam.

Uma segunda ordenação é então realizada neste conjunto, procurando ordenar tanto as soluções dominadas quanto as não dominadas em função da proximidade entre as soluções no domínio de resposta. Esta proximidade é avaliada pela aresta média do maior cubóide que pode ser posicionado ao redor de uma solução sem incluir uma solução vizinha [Deb *et al* 2001], como ilustrado para um domínio de resposta bidimensional na figura abaixo.

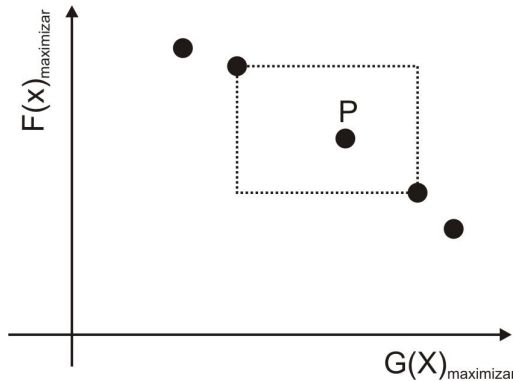


Figura 4.6- Quadrilátero que representa a distância entre uma solução P e as suas soluções vizinhas.

O objetivo da ordenação pela proximidade entre as soluções é garantir que as regiões que não estejam representadas de maneira adequada (grandes distâncias aos pontos vizinhos) tenham prioridade de seleção, o que contribui para que a fronteira de Pareto seja discretizada uniformemente. Após esta segunda ordenação os primeiro N elementos (onde N representa o tamanho da população) são selecionados como o novo histórico das soluções não dominadas. Este novo histórico também é utilizado para a formação de uma nova geração por meio das operações de crossing-over e mutação.

Seleção:

Neste caso a probabilidade dos indivíduos serem selecionados para as operações de crossing-over e mutação depende mais uma vez do operador de proximidade, ilustrado na figura 4.6.

As características apresentadas acima tornam o método NSGA-II bastante eficiente na representação da fronteira de Pareto, assim como na taxa de convergência, quando comparados a algoritmos genéticos tradicionais [Deb *et al* (2001)].

Parâmetros utilizados:

O número de gerações utilizadas no NSGA-II para os estudos realizados no presente trabalho foram iguais a 1000. O tamanho das populações, função do número de variáveis incluídas no problema, será apresentado no capítulo 5.

A probabilidade de crossover utilizada foi igual a 0.9, e a probabilidade de mutação especificada como $1/L$, onde L representa o comprimento das strings binárias formadas pelos parâmetros de entrada.

4.4 Meta-Modelagem

Assim como os algoritmos de otimização, diversas metodologias estão disponíveis para a construção de meta-modelos, cada qual associada a um conjunto de vantagens e desvantagens. Diversos estudos procuram avaliar e quantificar a eficiência de diferentes modelos, porém este não é o objetivo do presente trabalho.

Nesta seção as características gerais associadas ao processo de construção de meta-modelos são brevemente introduzidas, e em seguida a metodologia escolhida para o presente trabalho é apresentada. De uma maneira geral o processo de construção de um meta-modelo envolve os seguintes passos:

- I. Criar um conjunto de dados a partir de um planejamento de experimentos;
- II. Escolher uma metodologia para construção do meta-modelo;
- III. Construir o meta-modelo;
- IV. Avaliar a qualidade da aproximação;

O primeiro passo consiste em obter o valor da função a ser modelada em alguns pontos do domínio de projeto. Para garantir um posicionamento eficiente destes pontos, técnicas de planejamento de experimentos são comumente utilizadas.

O segundo passo consiste na escolha da metodologia utilizada para construção do meta-modelo⁶.

O terceiro passo envolve a criação, ou treinamento, do meta-modelo. Caso o número de pontos utilizados para a construção do meta-modelo seja elevado, esta etapa pode limitar a escolha do meta-modelo.

O último passo consiste em verificar a qualidade da aproximação, que pode ser avaliada visualmente (se possível) ou pelos valores de erro entre a função aproximada e a função original.

4.4.1 Aproximações por Funções de Base Radial

As aproximações por funções de base radial foram propostas inicialmente por Hardy (1971), e têm se mostrado robustas e eficientes para a interpolação de funções a partir de pontos distribuídos de maneira irregular ao longo do domínio de projeto [Hardy 1990].

⁶ Em muitos casos a metodologia desejada pode apresentar restrições em relação a distribuição dos pontos utilizados para a sua construção (passo 1), ou até mesmo em relação ao número de pontos utilizados. Assim a inversão do primeiro e do segundo passo pode ocorrer sem que o processo seja prejudicado como um todo

O princípio de funcionamento destas aproximações consiste em uma regressão linear, que determina o valor da função numa posição x como a combinação linear de diversas funções.

Matematicamente, o valor da função aproximada, $\tilde{f}(x)$, em uma posição arbitrária x , pode ser representado, dentre muitas formas⁷, como:

$$\tilde{f}(\mathbf{x}) = \sum_{i=0}^P \Omega_i h_i(\mathbf{r}_i) \quad (4.2)$$

na qual Ω_i representam os coeficientes que devem ser determinados pela aproximação, e $h_i(r_i)$ representam funções de base pré-estabelecidas [ORR 1996].

No caso particular das funções de base radial, o índice P utilizado no somatório da equação 4.2 está associado ao número de pontos utilizados para a construção do meta-modelo, pois cada ponto irá contribuir para o valor da função aproximada na posição x .

A contribuição de cada ponto é determinada pelo argumento passado para as funções de base $h_i(r_i)$, que representa a distância entre o ponto em questão e a posição onde a função aproximada deve ser calculada. Essa distância é identificada como raio, o que explica o nome atribuído à aproximação.

O raio associado a um ponto P é calculado como:

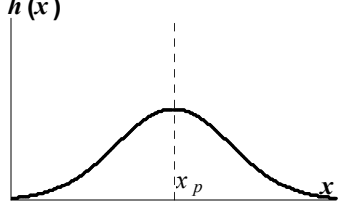
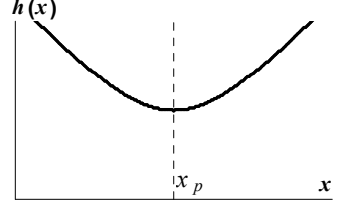
$$\mathbf{r}_P = \mathbf{x} - \mathbf{x}_P \quad (4.3)$$

Assim cada ponto utilizado para a construção do meta-modelo está associado a um raio, relacionado à sua área de influência, e a uma função de base $h_i(r_i)$. Nas aproximações por funções de base radial as expressões $h_i(r_i)$ são idênticas para todos os pontos. Assim a contribuição de cada ponto é diferenciada apenas pelo raio e pelo coeficiente Ω_i .

Diversas expressões podem ser escolhidas para as funções $h_i(r_i)$. A tabela abaixo apresenta duas comumente utilizadas: as Gaussianas e as multi-quadráticas.

⁷ Uma formulação mais geral para as funções de base radial pode ser encontrada em Buhmann 2003.

Tabela 4.2 – Diferentes modelos para funções de base radial.

Função	Equacionamento	Gráfico
Gaussiana	$h(r_p) = \exp\left(-\left(\frac{x - x_p}{c}\right)^2\right)$ $c = \text{Fator de forma}^*$	
Multi-quadrática	$h(r_p) = \frac{\sqrt{c^2 + (x - x_p)^2}}{c}$ $c = \text{Fator de forma}^*$	

Uma vez escolhida a função de base, os coeficientes Ω_i apresentados na seção 4.3 devem ser calculados, de maneira que a função aproximada fique o mais próxima possível dos pontos utilizados para a sua construção.

Uma vantagem associada às aproximações por funções de base radial é que por serem baseadas em regressões lineares⁸, e passarem por todos os pontos utilizados na sua construção, os coeficiente Ω_i podem ser calculados de maneira exata (dedução no apêndice III). Uma vez determinado os coeficientes Ω_i o valor da função aproximada pode ser calculado com a função 4.2.

Para ilustrar a aplicação das aproximações por funções de base radial, considere a função desconhecida $F(x)$, que atua no intervalo $0.2 \leq x \leq 1.4$, a qual se deseja representar por um modelo matemático simplificado.

Como explicado anteriormente, o primeiro passo para a construção do meta-modelo consiste em realizar amostragens do comportamento da função ao longo do domínio de projeto. Neste caso optou-se por uma distribuição uniforme ao longo do domínio de projeto, como ilustrado na figura a seguir⁹.

⁸ Na verdade as aproximações por Funções de Base Radial podem ser utilizadas tanto em regressões lineares quanto não lineares, embora a primeira seja mais difundida, em função da sua facilidade de manuseio.

⁹ Neste caso supõe-se que a avaliação da função $F(x)$ e da variável independente x consistem em processos determinísticos, isto é, sem nenhum erro associado as mesmas.

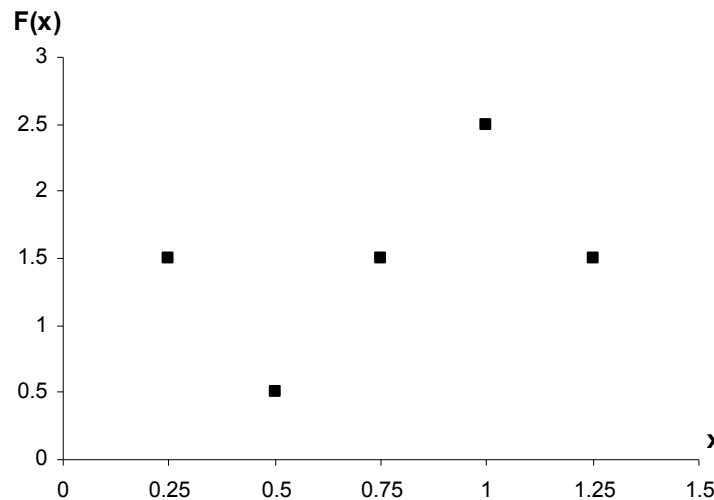


Figura 4.7 –Exemplo utilizado para representar a construção de meta-modelos.

O fator de forma neste exemplo foi escolhido propositalmente pequeno, para ilustrar possíveis problemas relacionados com o mesmo.

As figuras abaixo ilustram os resultados obtidos para a aproximação da função $F(x)$ ao utilizar funções Gaussianas e Multi-quadráticas. Além das funções aproximadas, a figura traz ainda a variação das funções de base multiplicadas pelos seus respectivos coeficientes Ω_i .

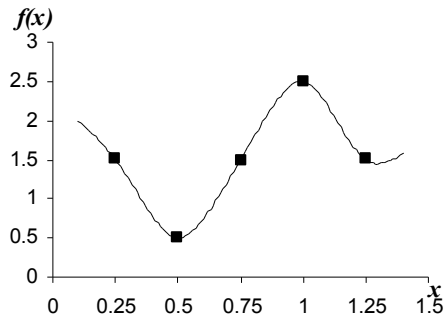
Na figura observa-se que o meta-modelo baseado nas equações Gaussianas não consegue representar de maneira adequada o comportamento das funções, o que se deve principalmente ao valor do fator de forma escolhido para a construção do meta-modelo.

Além da importância na qualidade da aproximação o fator de forma também está relacionado à suavidade da função aproximada e ao condicionamento do sistema linear utilizado para a determinação dos coeficientes Ω_i . Por este motivo a determinação deste fator merece atenção especial durante a construção do meta-modelo.

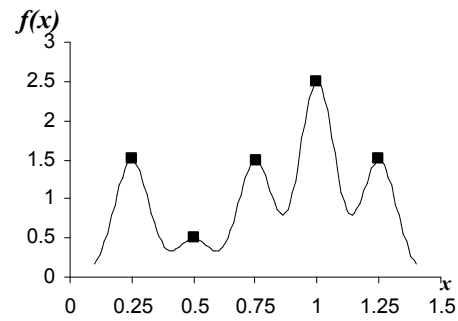
A metodologia adotada neste trabalho para a determinação do fator de forma consiste em selecionar o valor que garanta o menor erro avaliado pela validação cruzada do meta-modelo, explicada a seguir.

As aproximações por funções de base radial passam por todos os pontos fornecidos para a sua construção, e portanto nenhum erro é observado nestas regiões. Uma alternativa para avaliar a qualidade destas aproximações consiste em ignorar um dos pontos utilizados na sua construção, e analisar o erro nesta região.

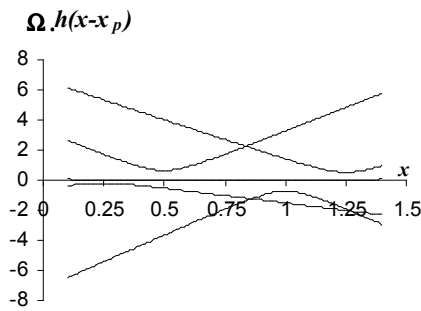
Esta operação pode ser repetida para cada um dos pontos fornecidos inicialmente, de maneira que a soma dos quadrados dos erros observados em cada ponto representa uma forma de avaliar a aproximação realizada, e o processo é identificado como validação cruzada.



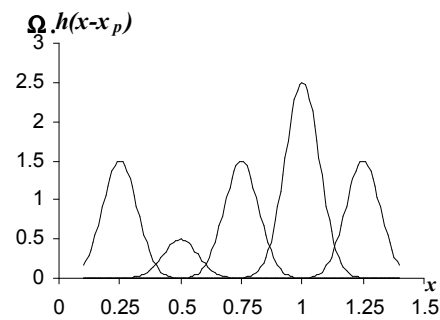
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 4.8- Aproximações por Funções de base Radial Multi-quadráticas (a), Gaussianas (b), e as funções $h_p(x - x_p)$ associadas às mesmas respectivamente nas figuras (c) e (d).

Como comentado anteriormente, a validação cruzada é utilizada no presente trabalho para a escolha do fator de forma. Neste caso o fator de forma é escolhido de maneira a garantir a menor soma possível dos erros obtidos na validação cruzada do meta-modelo.

Em relação às funções de base, optou-se no presente trabalho pela utilização das funções multi-quadráticas.

CAPÍTULO 05

RESULTADOS

As técnicas apresentadas no capítulo anterior foram aplicadas em um estudo de otimização relacionado à especificação de um inibidor de turbulência para um distribuidor de lingotamento contínuo. Os resultados são apresentados nas próximas seções.

Para avaliar a robustez da metodologia proposta, e da capacidade de redução dos custos computacionais, o estudo de otimização é resolvido com duas abordagens distintas.

Na primeira abordagem a função de correção global é calculada com base nas diferenças observadas entre os modelos de alta e baixa-fidelidade em 15 configurações distribuídas ao longo do domínio de projeto. Essa abordagem garante que o modelo de baixa-fidelidade seja corrigido de maneira acurada, mas ainda introduz um número razoável de análises de alta-fidelidade no problema.

A segunda abordagem considera que a função de correção no primeiro ciclo de otimização é constante, e igual à diferença observada na configuração inicial do inibidor de turbulência. Esta abordagem investe na capacidade das malhas grosseiras em indicar as regiões ótimas do domínio, porém pode exigir um número maior de iterações no ciclo apresentado na Figura 4.1.

A comparação dos resultados obtidos com as duas abordagens fornecerá um bom indicativo da robustez da metodologia proposta no presente trabalho.

5.1 Definição do Problema de Otimização

O problema abordado neste capítulo consiste na determinação dos parâmetros construtivos de um inibidor de turbulência, que devem ser escolhidos de maneira a otimizar a eficiência do distribuidor. É importante destacar que o projeto de um inibidor de turbulência envolve diferentes disciplinas além da mecânica dos fluidos, como análise estrutural, resistência à abrasão, entre outros.

Até mesmo do ponto de vista da mecânica dos fluidos o equipamento pode ser considerado para atender diferentes funções, como durante o preenchimento do distribuidor ou durante as trocas de panela.

No entanto estas análises não são consideradas no presente estudo, e a eficiência do distribuidor é avaliada unicamente em relação ao comportamento em regime permanente do equipamento, isto é, altura de banho e vazão constantes. A definição do modelo numérico utilizado para o distribuidor foi apresentada na seção 3.4.

Nas próximas seções são apresentados os parâmetros de entrada e funções objetivo selecionadas para o problema de otimização.

5.1.1 Variáveis de projeto e funções de restrição

Os parâmetros do inibidor de turbulência selecionados para o estudo de otimização foram o seu comprimento (C), altura (A), largura (L), profundidade (P), e comprimento da aba (a), apresentados na figura abaixo:

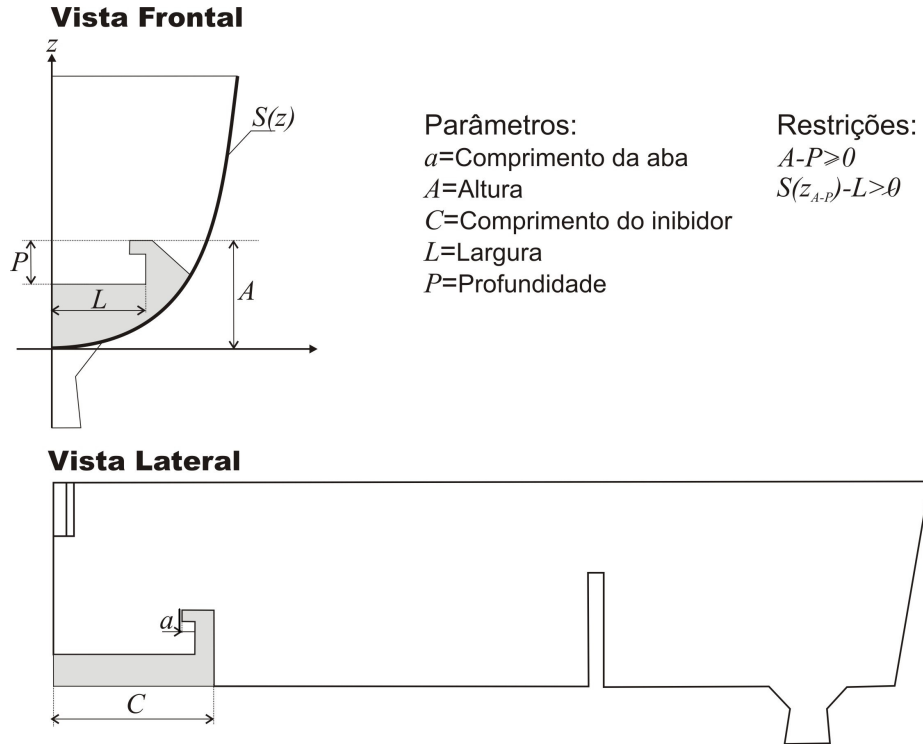


Figura 5.1- Parâmetros geométricos selecionados para a caracterização do inibidor de turbulência.

Em função do perfil do distribuidor na vista frontal, identificada como $S(z)$ na figura 5.1, a largura do inibidor de turbulência deve respeitar a restrição:

$$S(z_{A-P}) - L > 0 \quad (5.1)$$

De maneira semelhante a profundidade do inibidor é relacionada com a altura pela seguinte restrição:

$$A - P > 0 \quad (5.2)$$

Assim as variáveis assumem os seguintes valores máximos e mínimos:

$$\begin{aligned} 0.0 &< a < 0.6 \\ 1.6 &< A < 3.5 \\ 2.0 &< C < 5.0 \\ 2.0 &< L < S(A - P) \\ 1.0 &< P < A \end{aligned} \quad (5.3)$$

nas quais os valores mínimos e máximos foram adimensionalizados para facilitar a compreensão das proporções entre as variáveis. Os parâmetros relacionados ao inibidor e ao distribuidor que não foram mencionados nesta seção permaneceram constantes durante o estudo de otimização.

5.1.2 Funções Objetivo

As funções objetivo selecionadas para o problema são:.

a) *Remoção de Inclusões*

O processo de remoção de inclusões será avaliado por meio de análises lagrangeanas que irão calcular a trajetória de 4 conjuntos de partículas injetadas no domínio.

Cada conjunto apresenta um diâmetro específico (5, 30, 50 ou 100 μm) e é formado por 1000 partículas injetadas uniformemente na entrada do distribuidor. O número de partículas coletadas na escória para cada conjunto representa as funções objetivos que devem ser maximizadas durante o estudo.

b) *Volume Morto*

O volume morto representa uma estimativa da extensão volumétrica das regiões de recirculação no interior do distribuidor. Estas regiões dificultam o processo de remoção de inclusões, e podem originar materiais heterogêneos na saída dos moldes. Assim a fração de volume morto representa uma função objetivo a ser minimizada durante o estudo.

c) *Variância da curva DTR*

A variância da curva DTR representa a dispersão dos tempos de residência no interior do distribuidor. Deseja-se que os valores de tempos de residência sejam os mais próximos possíveis e, portanto, a variância da curva DTR representa uma função objetivo a ser minimizada durante o estudo.

Pode-se observar que as funções objetivo estão relacionadas entre si, e que provavelmente o número de objetivos poderia ser reduzido. Esta possibilidade será avaliada novamente com base nos resultados obtidos no planejamento de experimentos realizado na seção 5.3.1.

É importante destacar ainda que embora os níveis de velocidade na escória não tenham sido definidos como funções objetivo, esta variável será utilizada como critério de seleção entre as melhores soluções encontradas, para garantir que as configurações sejam escolhidas de maneira a preservar a integridade da escória.

5.2 Determinação das soluções de alta e baixa-fidelidade

O primeiro passo para o estudo de otimização do distribuidor com base em soluções aproximadas consiste em determinar os níveis de refino referentes a solução de alta e baixa fidelidade. Assumindo que o refino necessário para a obtenção de uma solução acurada não seja conhecido, o mesmo pode ser determinado com um estudo de convergência de malha.

O estudo envolve a solução do mesmo problema com diferentes níveis de refino, utilizando malhas com 25, 100, 250, 500 e 1000 mil nós. Neste trabalho optou-se pela utilização de malhas que apresentassem a mesma proporção de refino entre diferentes regiões do domínio. Desta maneira nenhuma região específica foi favorecida, o que garante que a influência do refino fosse avaliada em toda a extensão do domínio. As malhas utilizadas neste estudo são apresentadas no apêndice III.

O problema é então resolvido para cada malha, e os valores das funções objetivo são monitorados. Os valores das funções objetivo para os diferentes refinamentos de malha são apresentados na figura 5.2.

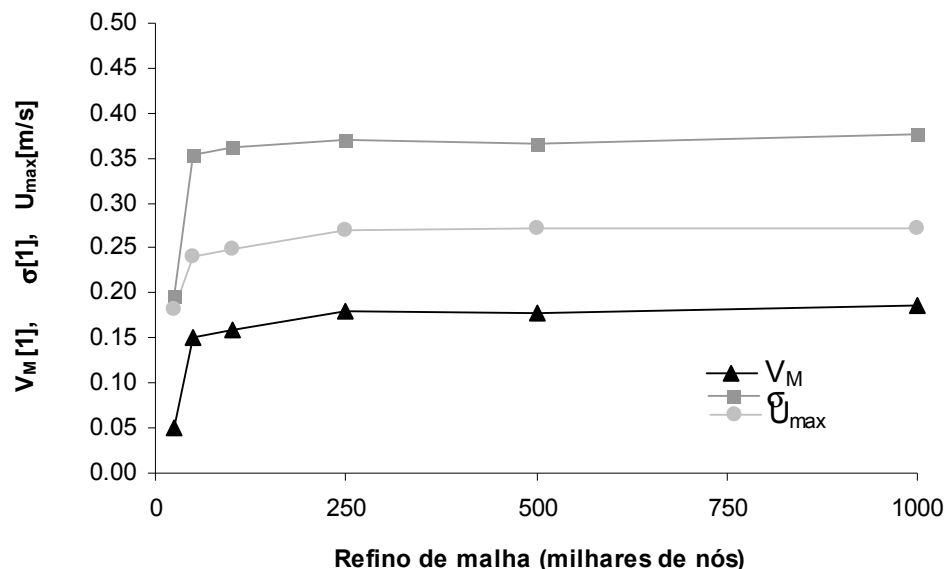


Figura 5.2- Convergência das funções objetivo com o refino de malha.

Neste trabalho optou-se por não incluir o número de partículas coletadas no estudo de convergência de malha, pois a alteração do refino da malha influencia não somente o campo de velocidades utilizado no cálculo das forças que atuam sobre a partícula, mas também o número de passos/integrações utilizados para calcular a trajetória das mesmas¹. Esta dependência dificulta análises conclusivas sobre a influência do refino de malha nas soluções lagrangeanas.

¹ No software Ansys CFX a discretização temporal utilizada para avaliar a trajetória das partículas é informada pelo número de passos realizados em cada elemento da malha [Ansys CFX 2006].

Para auxiliar na seleção do modelo de alta-fidelidade, as diferenças percentuais em relação ao resultado observado na malha mais refinada são calculadas. Estas diferenças podem ser colocadas na forma:

$$|erro\%| = \frac{|R_{malha} - R_{refinada}|}{R_{refinada}} \quad (5.4)$$

na qual R_{malha} e $R_{Re\ refinada}$ representam, respectivamente, os resultados obtidos para os diferentes níveis de refino e o resultado referente à malha mais refinada. Estes erros são ilustrados na figura abaixo para as diferentes funções objetivo:

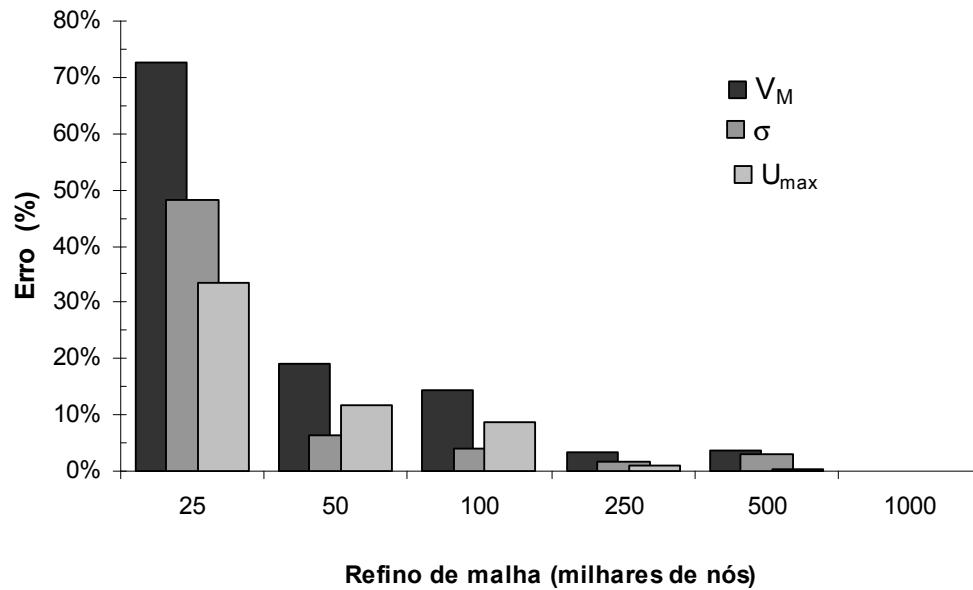


Figura 5.3- Erro no cálculo das funções objetivos em relação à solução da malha de maior refino. (V_M =Volume Morto, σ =Variância da DTR e U_{MAX} =máxima velocidade na escória)

Os erros a partir da malha de 250 mil nós são da ordem de 5%, o que se demonstrou satisfatório para o presente trabalho, e assim este refino foi selecionado para representar a solução de alta-fidelidade do distribuidor.

A malha de 25 mil nós foi considerada como a solução de baixa fidelidade, pois ainda consegue representar de maneira adequada a geometria do distribuidor, e apresenta um número de elementos razoável nas seções transversais dos dutos de entrada e saída do equipamento. A ilustração dos refinamentos de malha utilizados neste estudo encontram-se no apêndice III.

O tempo total de processamento das análises de alta fidelidade em um processador Intel E6400 com duplo núcleo e frequência de 2.13GHz é de aproximadamente 11 (onze) horas, enquanto as análises de baixa fidelidade no mesmo processador levam

aproximadamente 1 (uma) hora. Estes tempos consideram todos os passos apresentados na figura 3.11, sendo que as análises em regime permanente e transiente foram processadas com os dois núcleos do processador (processamento paralelo).

O passo de tempo utilizado nas análises transientes também foi determinado em função de uma análise de convergência das funções objetivo que dependem da curva DTR. Os resultados deste estudo são apresentados no apêndice 04².

A determinação dos modelos de alta e baixa-fidelidade representa uma etapa comum às duas abordagens analisadas neste capítulo. As etapas seguintes dependem da estratégia adotada, e por isso serão analisadas separadamente nas próximas seções.

5.3 Caso 01-Função de correção global variável

A primeira abordagem aplicada no estudo de otimização do inibidor de turbulência utiliza uma função de correção global calculada com base nas diferenças observadas entre os modelos de alta e baixa-fidelidade em 15 configurações distribuídas ao longo do domínio de projeto. Esta abordagem garante uma boa precisão aos modelos de baixa-fidelidade, porém o cálculo das 15 configurações pela ferramenta de alta-fidelidade introduz um custo computacional considerável no estudo.

Assim o número de configurações selecionadas para construção da função de correção passa a representar uma relação de compromisso entre acurácia global desejada para o modelo de baixa fidelidade e o custo computacional desejado para determinar a região ótima de operação.

No presente trabalho, a comparação entre os resultados obtidos com os modelos de alta e baixa-fidelidade para as 15 configurações iniciais, além de garantir a acurácia global, também permitirá uma importante avaliação da capacidade das malhas grosseiras em representar o comportamento das malhas refinadas.

Os resultados obtidos pelo modelo de alta-fidelidade para as 15 configurações também será utilizado para avaliar as possíveis correlações entre as funções objetivo definidas para o problema. Caso correlações sejam detectadas o número de funções objetivo pode ser reduzido, o que simplificaria o problema de otimização.

² O passo de tempo utilizado nas análises transientes também poderia ser variado entre os modelos de alta e baixa-fidelidade. No entanto esta abordagem não foi utilizada no presente trabalho, que considerou o refino de malha como sendo a única diferença entre os modelos de alta e baixa-fidelidade.

5.3.1 Planejamento de Experimentos Computacionais

Uma vez determinados os modelos de alta e baixa-fidelidade, as funções de correção global entre os modelos precisam ser especificadas para o primeiro ciclo de otimização ilustrado na Figura 4.1.

Na primeira abordagem a função de correção utilizada na primeira iteração é criada com base nas diferenças observadas entre os modelos em 15 configurações distribuídas ao longo do domínio de projeto. Em função do pequeno número de análises e das restrições aplicadas sobre algumas das variáveis de projeto, a distribuição das configurações foi realizada com o algoritmo D-Optimal [modeFrontier 2007].

O algoritmo utilizou como entrada um planejamento fatorial completo, com 04 níveis ao longo de cada variável de projeto, resultando assim em 1024 configurações. As configurações inválidas foram em seguida removidas, e das configurações restantes 15 configurações foram selecionadas pelo algoritmo D-Optimal, com o objetivo de minimizar a correlação entre os experimentos, o que por sua vez garante uma melhor distribuição das configurações.

É importante salientar que durante a análise destas 15 configurações, e de todas as análises desenvolvidas no presente trabalho, vários parâmetros são monitorados para garantir que as configurações foram avaliadas de maneira adequada. Estes parâmetros envolvem os resíduos das equações de conservação, assim como critérios de qualidade das malhas geradas (ângulo, razão de aspecto, e taxa de crescimento da malha).

Uma vez analisadas as 15 configurações, os valores das funções objetivo podem ser estudados para averiguar possíveis correlações³ entre as mesmas.

Primeiramente, analisou-se o comportamento das inclusões de diferentes tamanhos, pois se espera que o número de partículas coletadas sejam qualitativamente semelhantes para partículas de diferentes tamanhos. A matriz de correlação entre as partículas de diferentes tamanhos é apresentada na Figura 5.4(a), enquanto a Figura 5.4(b) apresenta os

³ A correlação, ρ , representa uma medida adimensional da covariância entre duas variáveis.

Para duas variáveis quaisquer, x_1 e x_2 , pode ser calculada pela expressão:

$$\rho = \frac{(x_1 - \bar{x}_1) \cdot (x_2 - \bar{x}_2)}{\sigma_1 \cdot \sigma_2}$$

O valor de correlação varia entre -1 e 1, e indica a dependência estatística entre duas variáveis. Um valor de correlação igual a zero indicaria que as variáveis são estatisticamente independentes, enquanto valores negativos indicam que a variação positiva de uma está relacionada com a variação negativa da outra, e valores positivos indicam que as variações das duas funções estão relacionadas e apresentam o mesmo sentido.

Quando assume valores extremos de -1 e 1 diz-se que as variáveis estão perfeitamente correlacionadas.

valores absolutos destas variáveis para as diferentes configurações analisadas no planejamento de experimentos.

Como esperado, observa-se um índice de correlação entre o número de partículas coletadas com diâmetros de 30 e 50 μm , em função da proximidade dos diâmetros destas partículas, assim como entre as partículas de 50 e 100 μm ⁴. As partículas de 5 μm não apresentaram modificações significativas no número absoluto de partículas coletadas. Com base nestas informações as partículas com diâmetro de 50 μm foram selecionadas para representar o comportamento das inclusões no interior do distribuidor, reduzindo assim o número de funções objetivo associadas ao problema.

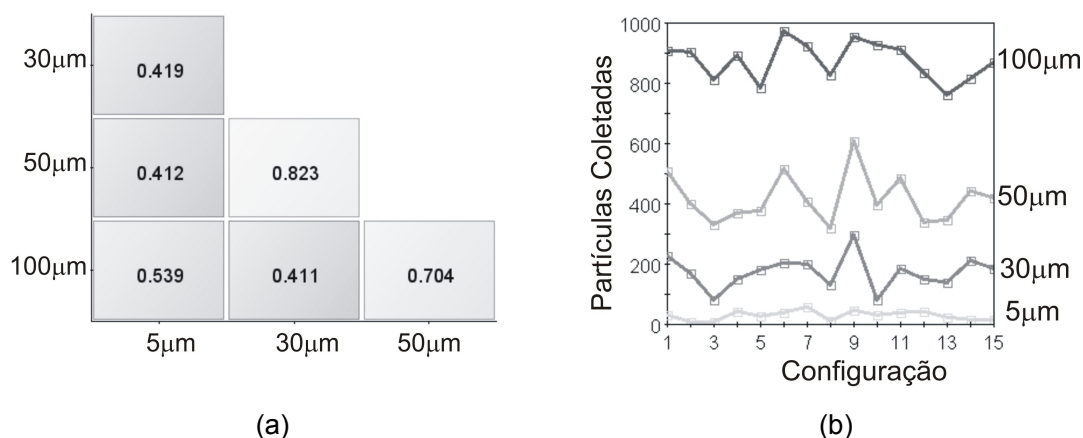


Figura 5.4-Matriz de correlação entre as inclusões removidas para diferentes tamanhos (a), e valores de remoção das inclusões para as diferentes configurações analisadas (b).

Em seguida a mesma análise foi realizada entre o volume morto e a variância da DTR. A correlação verificada entre as variáveis foi de 0.622, e a variação das mesmas para as diferentes configurações é apresentada na Figura 5.5 (a).

A análise dos valores normalizados de variância e volume morto para as diferentes configurações demonstra uma forte similaridade entre o comportamento das duas variáveis. Isso indica que uma das variáveis pode ser descartada no estudo de otimização, já que a minimização de uma irá, com grandes chances, garantir a minimização da outra.

⁴ É importante lembrar que os valores de correlação, quando analisados de maneira isolada, podem mascarar informações a respeito da verdadeira correlação entre as variáveis. Por este motivo a matriz de correlação, figura 5.4(a), é analisada juntamente com o gráfico ilustrando o comportamento das variáveis na figura 5.4(b).

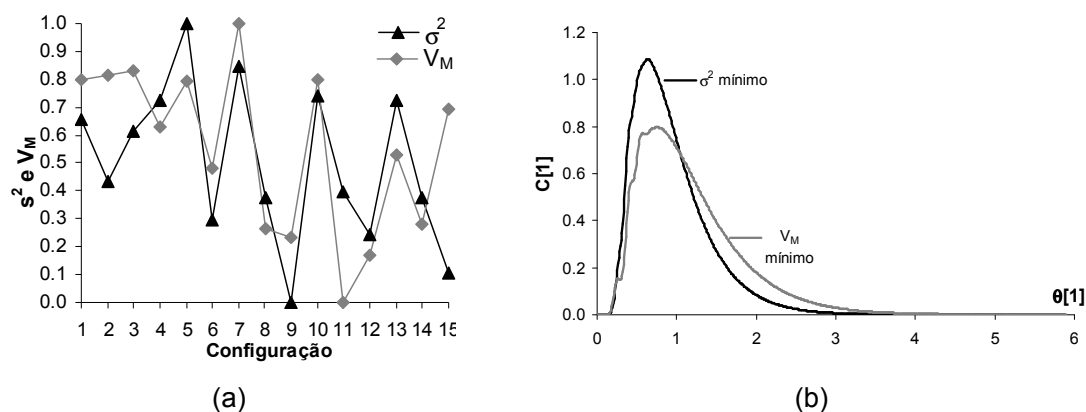


Figura 5.5- Valores normalizados de variância e volume morto para as diferentes configurações (a). Curvas DTR para os valores mínimos de variância e Volume Morto observados (b).

Ao analisar as curvas DTR para as configurações de menor variância, e menor Volume Morto, apresentadas na Figura 5.5(b), percebe-se que a configuração de menor variância apresenta uma melhor distribuição para a DTR, já que a área do gráfico para os tempos de residência superiores à duas vezes o tempo teórico são menores. A redução da variância é escolhida, portanto, como a segunda função objetivo para o problema.

Outra análise importante é verificar a correlação entre os valores das funções objetivo obtidas com os modelos de alta e baixa-fidelidade. Essa análise indicará a potencialidade das malhas grosseiras em prever o comportamento do modelo de alta fidelidade.

Os valores normalizados das inclusões coletadas ($50\mu\text{m}$), variância da DTR e velocidade máxima na escória obtidas com os dois modelos são apresentados na figura abaixo, juntamente com os valores de correlação entre os dois modelos.

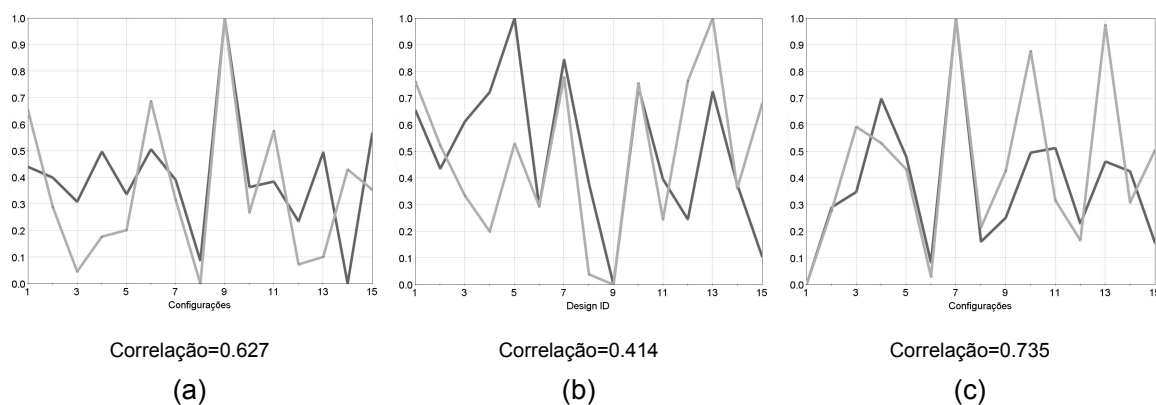


Figura 5.6- Valores normalizados para o número de partículas coletadas (a), variância da DTR (b) e velocidade máxima na escória (c) obtidos com o modelo de alta-fidelidade (cinza escuro) e baixa fidelidade (cinza claro).

Observa-se que os perfis obtidos com os dois modelos apresentam similaridades importantes, principalmente em relação ao posicionamento dos extremos das funções. Isso indica que as malhas grosseiras apresentam uma boa capacidade em representar o comportamento qualitativo das malhas refinadas, o que fortalece a validade das análises multi-fidelidade propostas no presente trabalho.

Nas regiões onde os resultados dos dois modelos divergem, as funções de correção podem então ser utilizadas para adequar a representação do modelo de baixa fidelidade.

5.3.2 Funções de Correção

As funções de correção adotadas no presente trabalho consistem nas correções aditivas, calculadas a partir da diferença entre os modelos de alta e baixa-fidelidade para cada função objetivo nas 15 configurações analisadas.

Os valores de correção são então extrapolados para o restante do domínio de projeto com auxílio das funções de base radial. Os fatores de forma utilizados nas expressões multi-quadráticas foram selecionados de maneira a minimizar os erros observados quando algum dos 15 pontos é extraído do processo de construção da aproximação.

5.3.3 Planejamento de Experimentos (solução de baixa-fidelidade)

Uma vez criadas as funções de correção, o estudo volta-se para a resolução do problema de otimização com base nas soluções de baixa-fidelidade.

O primeiro passo consiste na escolha do conjunto de configurações que será utilizado para representar o comportamento da solução do modelo de baixa-fidelidade ao longo do domínio de projeto.

Como as avaliações do modelo de baixa-fidelidade são relativamente rápidas, o planejamento de experimentos pode usar técnicas robustas e eficientes, como o planejamento fatorial completo. O planejamento utilizou 5 níveis ao longo do comprimento, 4 ao longo da altura e profundidade, 3 ao longo da largura e 2 para o comprimento da aba do inibidor, procurando discretizar de maneira uniforme o domínio de projeto.

Este planejamento não considerou as restrições aplicadas sobre a profundidade e largura, e por isso as configurações inválidas foram em seguida removidas do conjunto, resultando em 70 configurações viáveis. Estas configurações foram então analisadas e utilizadas para a criação do meta-modelo inicial das análises de baixa-fidelidade.

O meta-modelo foi mais uma vez criado com as aproximações por funções de base radial com expressões multi-quadráticas. O fator de forma foi determinado da maneira descrita na seção 5.3.2.

5.3.4 Solução do problema

A solução das 70 análises de baixa fidelidade, utilizadas na construção do meta-modelo, são apresentadas na Figura 5.7 (a), onde o eixo horizontal representa o número de partículas coletadas e o vertical a variância da DTR.

O resultado relativo à configuração inicial, embora não seja utilizado na resolução do problema, é apresentada na mesma figura, indicado por uma cruz. Percebe-se que a configuração inicial, relativa ao projeto que opera atualmente na aciaria, faz parte da fronteira de Pareto na primeira iteração do ciclo.

Em seguida o algoritmo genético NSGA-II foi aplicado sobre o meta-modelo para identificar as regiões ótimas de operação. O tamanho da população utilizada foi de 70 configurações, e o número de gerações foi especificado como 1000, o que garante uma boa diversidade genética. Como foram analisadas com base em um meta-modelo, as 70000 análises tomaram somente alguns minutos de processamento.

Os resultados obtidos com o primeiro meta-modelo estão apresentados na Figura 5.7 (b). Destes resultados, dez configurações são selecionadas ao longo da fronteira de Pareto, e são novamente analisadas pelo modelo de baixa-fidelidade. Os novos resultados são apresentados na Figura 5.7 (c). O meta-modelo é atualizado com base nos novos resultados, e o algoritmo NSGA-II é mais uma vez aplicado. Os resultados são apresentados na Figura 5.7 (d).

O processo é repetido quatro vezes, até que modificações expressivas não são observadas na posição da fronteira de Pareto virtual. Os resultados reais e virtuais destas duas iterações estão apresentados na Figura 5.7 (e), (f), (g) e (h).

As figuras 5.7(a), (c), (e) e (g) ilustram como as análises fluido-dinâmicas a partir da primeira iteração são concentradas na região ótima de operação. As figuras 5.7 (b), (d), (f) e (h) indicam a importância da atualização dos meta-modelos, já que a posição da fronteira de Pareto muda consideravelmente a medida que os mesmos são atualizados.

Embora as melhorias apresentadas na figura 5.7(g) sejam promissoras, deve-se lembrar que os resultados ainda estão relacionados ao modelo de baixa-fidelidade, e assim a acurácia dos mesmos deve ser investigada (passo 10 da Figura 4.1).

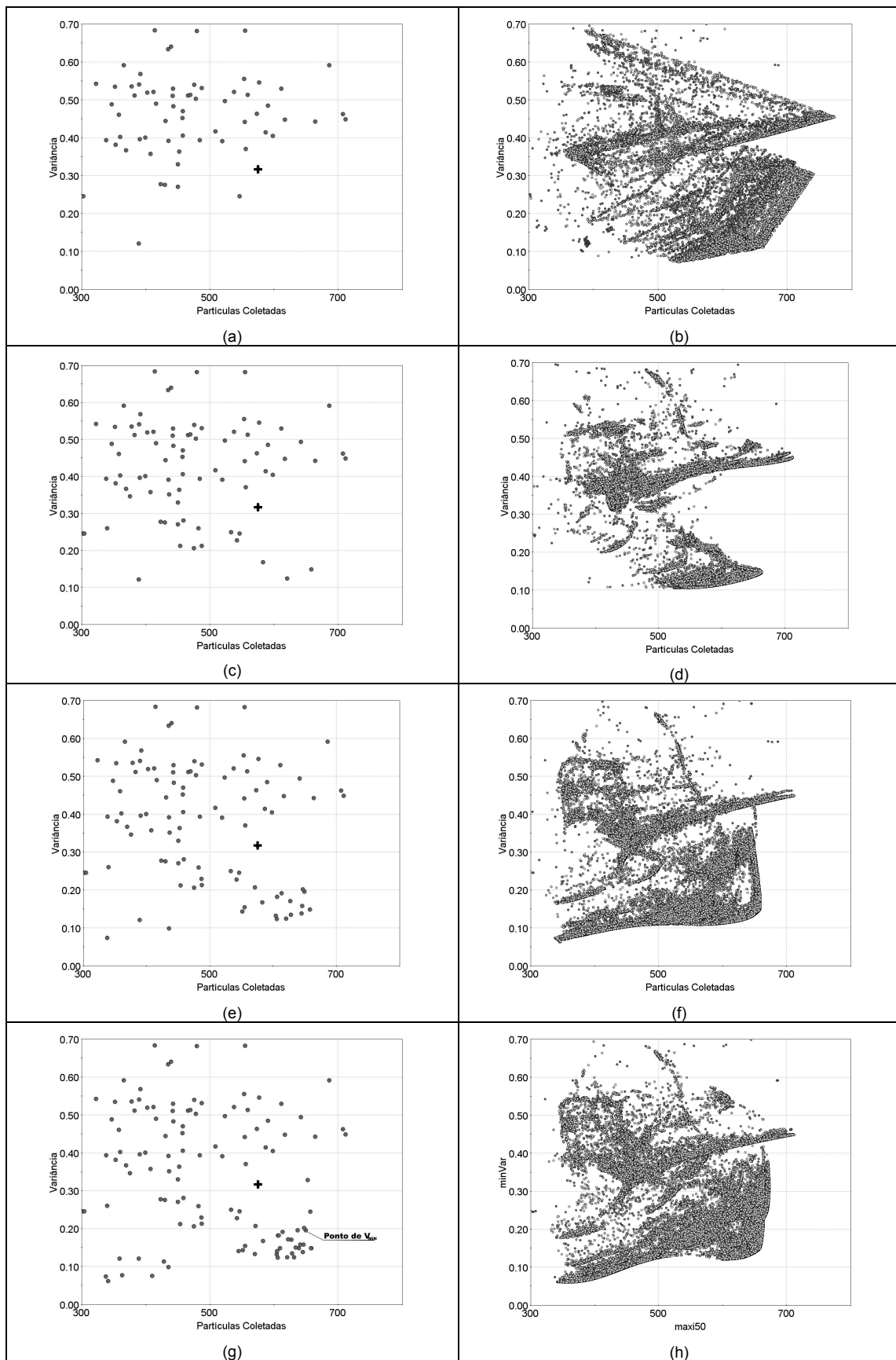


Figura 5.7-Convergência do processo no modelo de baixa fidelidade. Soluções reais à esquerda, virtuais à direita.

5.3.5 Análise da Acurácia

A melhor solução encontrada até o momento deve ser analisada pelo modelo de alta-fidelidade para verificar a acurácia da solução de baixa-fidelidade. Como mencionado anteriormente, o critério para seleção da melhor configuração leva em conta não apenas os valores de partículas coletadas e variância da DTR, mas também os níveis de velocidade na escória. O ponto ótimo de operação selecionado com base nestes critérios é apresentado na Figura 5.7 (g).

A comparação entre os resultados de alta e baixa-fidelidade é apresentado na tabela abaixo:

Tabela 5.1- Comparação de resultados para ponto ótimo de operação.

Propriedade	Baixa-Fidelidade	Alta-Fidelidade	Erro
Partículas Coletadas	649	620	4.6%
Variância da DTR	0.20	0.24	16.6%
Velocidade na escória (m/s)	0.214	0.209	0.2%

É importante destacar que apesar dos erros percentuais ilustrados acima, a configuração encontrada já apresenta ganhos da ordem de 13% para o número de partículas coletadas e 30% para variância da curva DTR quando comparadas à configuração inicial⁵. No entanto optou-se por realizar uma segunda iteração do ciclo de otimização, somente para confirmar a posição do ponto ótimo de operação. Neste caso o meta-modelo que representa a função de correção global foi atualizado com base na nova solução avaliada.

Todas as soluções de baixa-fidelidade obtidas até o momento foram atualizadas com a nova função de correção, e os resultados são apresentados na Figura 5.8 (a).

O meta-modelo relacionado à solução do sistema de baixa-fidelidade foi também atualizado, e o algoritmo NSGA-II mais uma vez aplicado. Os resultados são apresentados na Figura 5.8 (b).

Novamente uma dezena de configurações foi selecionada sobre a fronteira de Pareto e avaliada com o modelo de baixa-fidelidade. As novas soluções foram utilizadas para atualizar o meta-modelo, e o algoritmo NSGA-II foi mais uma vez aplicado, porém nenhuma modificação significativa foi percebida na fronteira de Pareto, Figura 5.8 (d), e o estudo foi encerrado.

⁵ A comparação dos resultados entre a configuração inicial e as configurações ótimas encontradas serão apresentadas no final do capítulo.

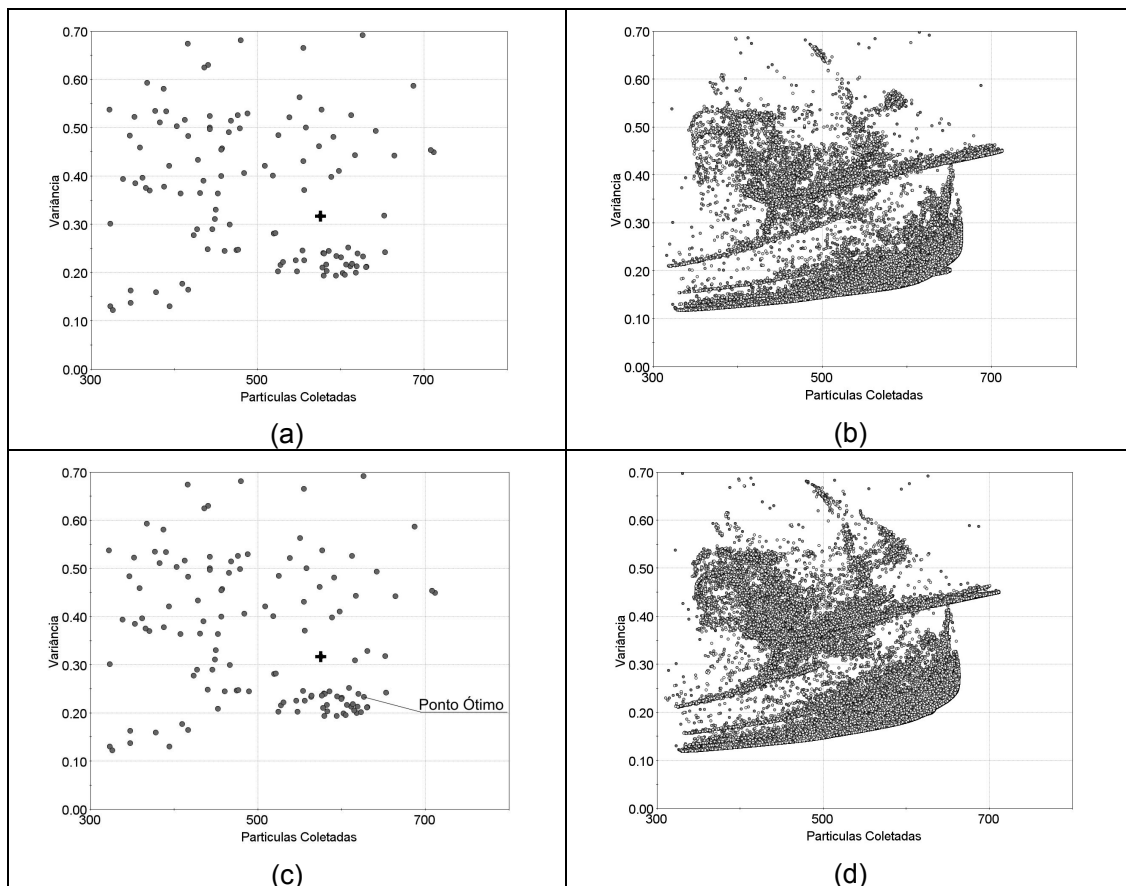


Figura 5.8-Convergência do processo na segunda iteração do ciclo de otimização. Soluções reais à esquerda, virtuais à direita.

O ponto ótimo foi mais uma vez selecionado com base no número de inclusões removidas, variância da DTR e velocidade máxima na escória, e está indicado na Figura 5.8 (c). A solução ótima encontra-se próxima à encontrada no primeiro ciclo do processo. Esta configuração foi mais uma vez avaliada pelo modelo de alta-fidelidade. Os erros percentuais em relação ao número de inclusões removidas, variância da DTR e velocidade máxima na escória foram respectivamente 1.4%, 0.1% e 2.5%.

Os ganhos em relação à configuração inicial foram da mesma ordem dos mencionados anteriormente. Uma comparação detalhada entre as duas configurações será apresentada no final do capítulo.

5.4 Caso 2- Função de Correção Constante

Embora a utilização de uma função de correção variável forneça uma grande acuracidade aos modelos de baixa-fidelidade, as análises de alta-fidelidade envolvidas na sua construção são indesejadas, pois encarecem o estudo computacionalmente. Em muitos casos o número de análises utilizadas para a construção das funções de correção serão

mínimos, para poupar recursos computacionais, e assim a metodologia adotada para o estudo de otimização deve ser robusta em relação a este parâmetro.

Para verificar esta robustez, o mesmo problema é resolvido com uma função de correção global construída a partir de uma única análise, realizada durante o estudo de convergência de malha na configuração original.

Assim a função de correção fica com valor constante na primeira iteração, porém será modificada nas iterações posteriores, quando as possíveis regiões ótimas sejam validadas com o modelo de alta-fidelidade. É importante destacar que neste caso o modelo só será calibrado nas regiões próximas ao ponto ótimo de operação, e assim não permitirá análises acuradas sobre outras regiões do domínio.

Portanto a opção entre as duas abordagens reside na relação de compromisso entre o custo computacional e a acurácia global desejada para o estudo. Deve-se lembrar ainda que a utilização de uma função de correção constante na primeira iteração pode exigir um número maior de ciclos globais apresentados na Figura 4.1. Como a função de correção é constante, a análise é iniciada diretamente no passo 4 da Figura 4.1.

5.4.1 Planejamento de Experimentos (solução de baixa-fidelidade)

Para permitir uma comparação justa entre as duas abordagens, as mesmas 70 configurações utilizadas no estudo anterior foram consideradas nesta etapa. Como a única alteração entre as duas abordagens reside na função de correção adotada para o problema, as 70 configurações não precisaram ser re-avaliadas, simplesmente atualizadas em função da nova função de correção.

Os resultados corrigidos com base na nova função de correção global são apresentados na Figura 5.9 (a). A comparação entre a Figura 5.9 (a) e a Figura 5.7(a) permite a análise da influência da função de correção global sobre os resultados encontrados para as 70 configurações.

5.4.2 Solução do problema

Com base nos resultados observados para as 70 configurações o meta-modelo relacionado ao sistema de baixa-fidelidade é mais uma vez criado com auxílio das aproximações por funções de base radial.

O algoritmo NSGA-II é então aplicado sobre o meta-modelo, a fronteira de Pareto virtual é identificada e uma dezena de configurações são novamente selecionadas para análise de baixa-fidelidade. Os resultados são utilizados para atualizar o meta-modelo, e o processo é repetido por três iterações, como ilustrado na figura abaixo.

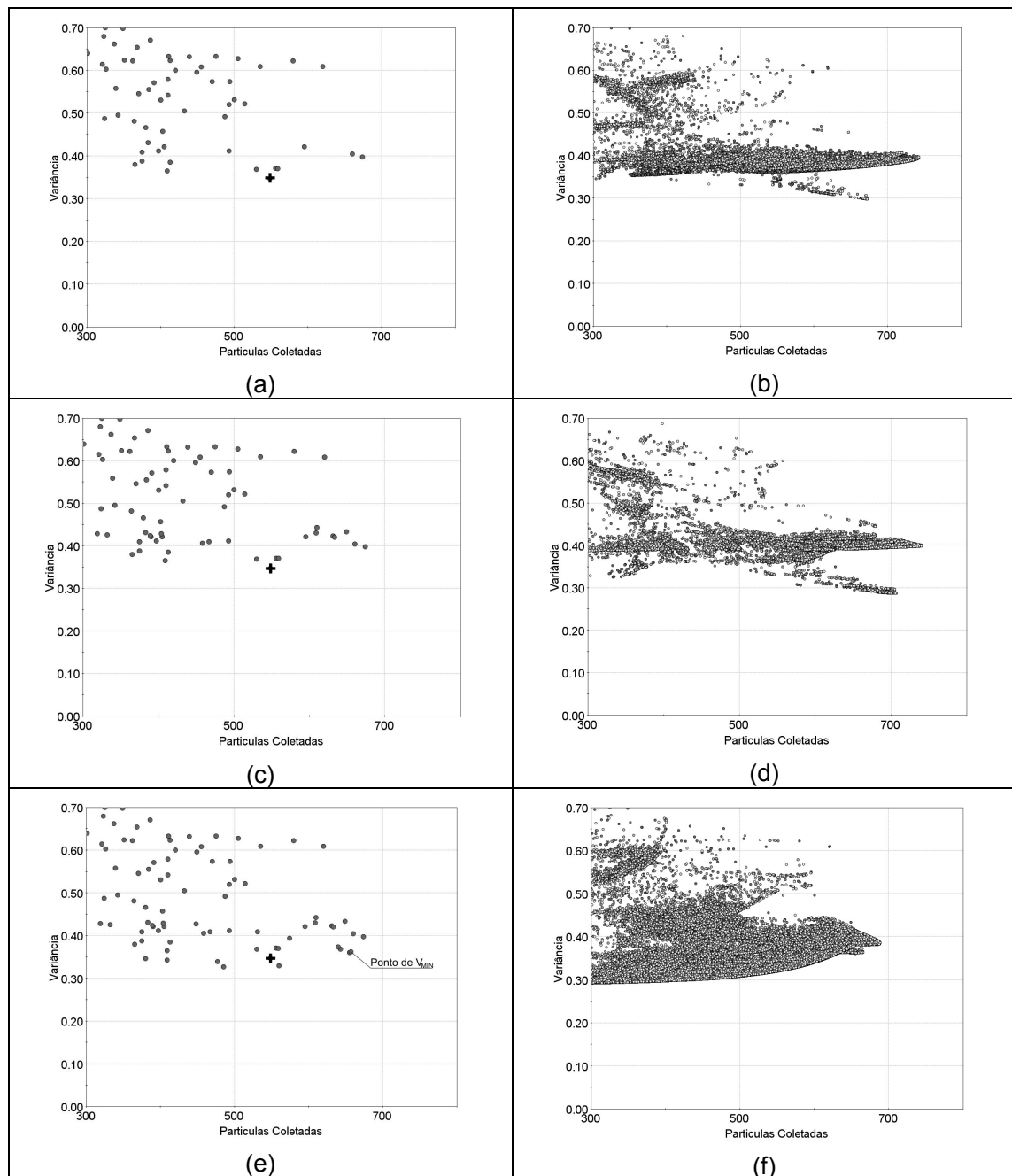


Figura 5.9- Convergência do processo no modelo de baixa fidelidade. Soluções reais à esquerda, virtuais à direita.

O critério de parada utilizado neste caso foi o fato da fronteira de Pareto virtual obtida na terceira iteração não apresentar melhorias significativas em relação aos pontos reais observados na Figura 5.9(e).

Além disso a acurácia dos pontos calculados até então não foi verificada, já que a função de correção global é constante. Assim é interessante que a acurácia seja verificada antes de prosseguir com as análises de baixa-fidelidade. O ponto ótimo foi mais uma vez

selecionado em função das funções objetivo e níveis de velocidade na escória, e está ilustrado na Figura 5.9(e).

Uma análise criteriosa deste ponto revelaria que esta configuração já está muito próxima da configuração ótima encontrada na primeira abordagem realizada, porém o estudo continua como se esta informação não estivesse disponível, verificando assim o número de análises necessárias para se chegar à conclusão de que o ponto realmente indica a região ótima de operação.

5.4.3 Análise da Acurácia

A tabela abaixo indica as diferenças observadas entre os modelos de alta e baixa-fidelidade para o ponto ótimo encontrado na primeira iteração do ciclo.

Tabela 5.2- Comparação de resultados para ponto ótimo de operação

Propriedade	Baixa-Fidelidade	Alta-Fidelidade	Erro
Partículas Coletadas	657	640	2.6%
Variância da DTR	0.36	0.25	44.0%
Velocidade na escória (m/s)	0.28	0.21	33.0%

Os erros são maiores aos encontrados no primeiro ciclo do estudo anterior, o que era esperado, já que a função de correção neste caso é constante. No segundo ciclo a função de correção deixa de ser constante pois as diferenças observadas acima são utilizadas para atualizá-la na suposta região ótima do domínio.

Os resultados obtidos com as análises fluido-dinâmicas realizadas na primeira iteração do processo são então atualizados com a nova função de correção, e as novas soluções são ilustradas na Figura 5.10 (a).

Nesta figura percebe-se que a configuração inicial, indicada por uma cruz, deixa de fazer parte da fronteira de Pareto, o que ilustra mais uma vez a importância das funções de correção na resolução do problema.

O meta-modelo associado à solução de baixa-fidelidade é mais uma vez atualizado, e o algoritmo NSGA-II é aplicado. Duas iterações são realizadas no processo, sendo que a fronteira de Pareto virtual obtida na segunda iteração não apresenta melhorias significativas em relação às configurações reais avaliadas até o momento, e o estudo é então encerrado. As duas iterações são ilustradas na figura abaixo:

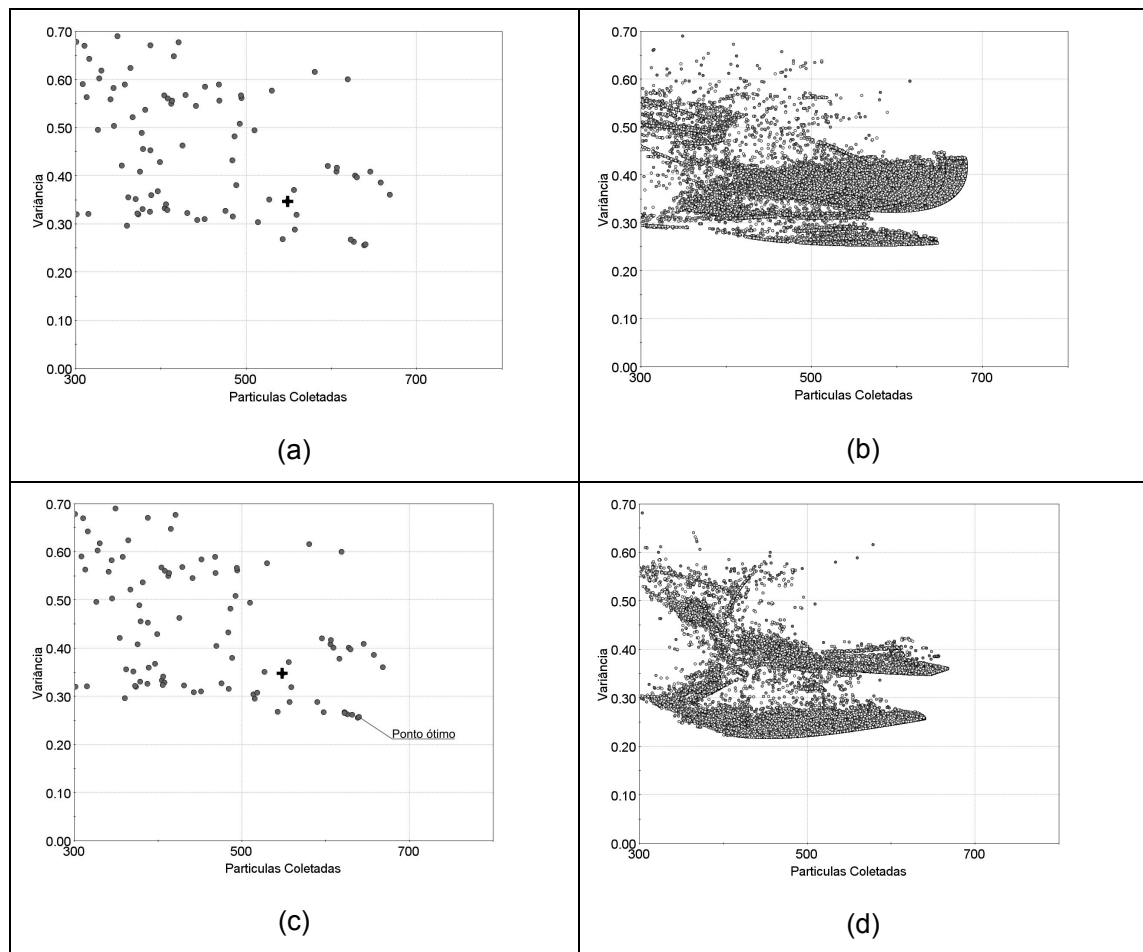


Figura 5.10- Convergência do processo na segunda iteração do ciclo de otimização. Soluções reais à esquerda, virtuais à direita.

Nas figuras 5.10 (b) e (d) percebe-se que a fronteira de Pareto encontrada com base no meta-modelo não é convexa. Como o objetivo desta segunda análise não era representar de maneira acurada toda a extensão da fronteira de Pareto, nenhuma investigação foi conduzida para avaliar possíveis causas para o formato da mesma.

A melhor configuração continua a encontrada no primeiro ciclo e, portanto, não apresenta erros em relação ao modelo de alta-fidelidade, já que a função de correção nesta posição é exata.

É importante destacar ainda que a fronteira de Pareto obtida neste estudo é diferente daquela obtida na primeira abordagem, o que era esperado, uma vez que a função de correção representa apenas ajustes locais, enquanto no caso anterior representava ajustes globais.

No entanto a configuração encontrada nesta abordagem está condizente com a encontrada no primeiro estudo, o que indica que o número de pontos utilizados para a função de correção estaria relacionado apenas com a acurácia global do modelo, e não com

a localização da região ótima de operação. A comprovação deste indicativo exigiria, no entanto, que a metodologia fosse testada em outros problemas de otimização.

Neste caso a região ótima foi encontrada com 110 análises de baixa fidelidade, o que representa aproximadamente 10 análises de alta fidelidade.

A comparação entre os resultados obtidos com as duas metodologias é apresentado a seguir.

5.5 Comparação entre resultados

Ambas as abordagens forneceram ganhos significativos para a eficiência do distribuidor, como ilustrado na tabela abaixo.

Tabela 5.3-Comparação entre os resultados obtidos e a configuração inicial.

Propriedade	Original	1° Abordagem		2° Abordagem	
		Valor	Ganho %	Valor	Ganho %
Partículas Coletadas	548	618	13%	640	16%
Variância da DTR	0.35	0.23	34%	0.25	29%
Velocidade na escória (m/s)	0.26	0.20	23%	0.21	19%

É interessante verificar ainda se, além dos ganhos encontrados, as duas abordagens forneceram configurações ótimas na mesma região do domínio de projeto.

A figura abaixo ilustra os valores encontrados pelas duas abordagens para cada uma das variáveis de projeto, representadas pelos eixos verticais, o que permite a análise multidimensional em uma única figura. As variáveis foram normalizadas em função dos valores máximos e mínimos que poderiam assumir para simplificar a análise.

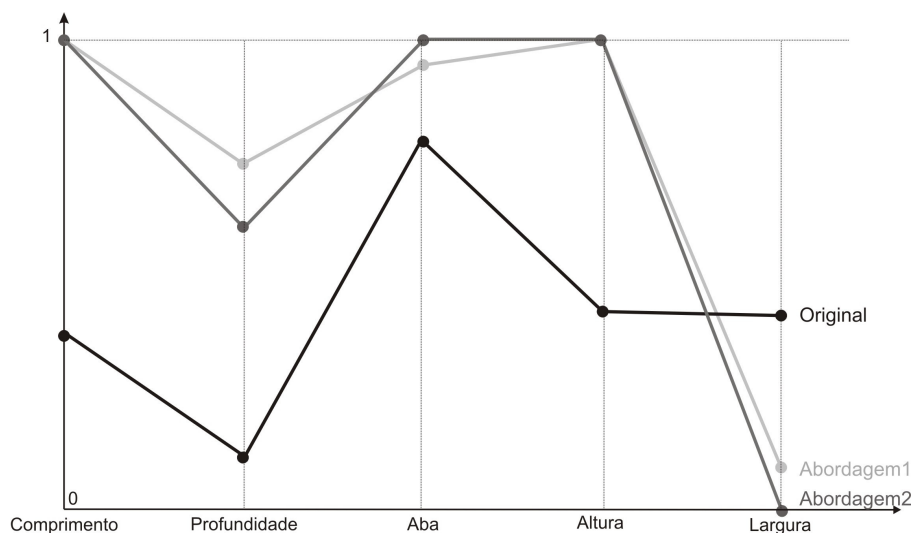


Figura 5.11- Configurações encontradas pelas duas abordagens e configuração inicial.

Percebe-se que as duas abordagens apresentam valores muito próximos para as variáveis de projeto, o que indica, para o caso analisado neste trabalho, a independência do resultado encontrado em relação à função de correção empregada no primeiro ciclo de otimização.

Pode-se observar que a solução otimizada para o inibidor de turbulência encontrada para o distribuidor analisado no presente trabalho apresenta comprimento, profundidade, altura e comprimento da aba maiores do que a configuração original, enquanto a largura do dispositivo é menor do que a original.

Observa-se ainda que algumas variáveis tiveram os valores posicionados nas extremidades do domínio de projeto, o que indica que uma melhoria ainda maior poderia ser atingida caso o domínio de projeto fosse aumentado. Esta possibilidade não foi verificada no presente estudo pois o objetivo principal era analisar a aplicação da metodologia baseada em malhas de diferentes refinamentos, que pôde ser verificada com o domínio de projeto atual.

A melhoria das variáveis que haviam sido eliminadas do problema devido a correlação com outras funções objetivo pode ser avaliada na tabela abaixo, onde detalhes sobre as configurações ótimas encontradas nas duas abordagens são apresentadas.

Tabela 5.4-Detalhes das configurações e resultados encontrados.

	Parâmetro	Original	Abordagem 1	Abordagem 2
Parâmetros de entrada*	Comprimento da aba	0.47	0.56	0.60
	Altura	2.40	3.50	3.50
	Comprimento	3.14	5.00	4.99
	Largura	2.66	2.14	2.00
	Profundidade	1.23	2.47	2.20
DTR	Variância	0.35	0.23	0.25
	Volume Morto (%)	18.6	13.0	16.9
	Tempo Mínimo	0.19	0.19	0.17
Inclusões coletadas	5 μ m	5	43	29
	30 μ m	209	272	284
	50 μ m	548	618	640
	100 μ m	928	928	924
X	Velocidade Máxima na escória	0.26	0.20	0.21

* Todos os parâmetros de entrada foram adimensionalizados para facilitar a comparação entre os mesmos.

A remoção de inclusões foi aperfeiçoada para todos os grupos de partículas (5, 30, 50 e 100 μ m), assim como a velocidade máxima observada na escória também foi reduzida, embora esta variável não tenha sido incluída como função objetivo no problema.

O volume morto, no entanto, não sofreu melhorias significativas na segunda abordagem, o que indica que o valor de volume morto poderia ser incluído como função objetivo em um estudo posterior.

A figura abaixo ilustra a geometria original e as encontradas pelas diferentes abordagens.

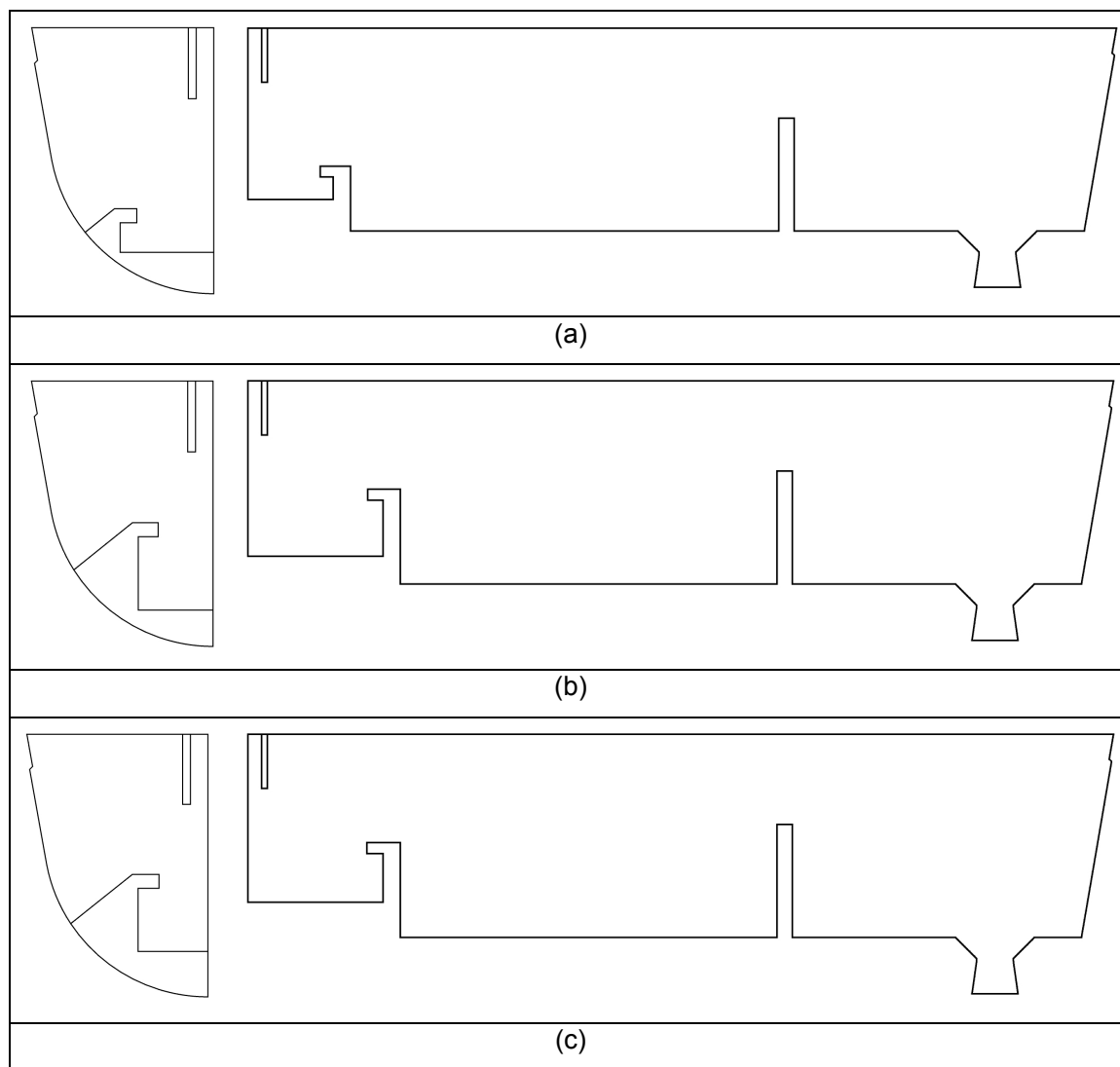


Figura 5.12- Vistas laterais e frontais do inibidor de turbulência na configuração original (a) e resultados otimizados encontrados com a abordagem 1(b) e 2(c).

A curva de distribuição dos tempos de residência para a melhor configuração encontrada é apresentada na figura a seguir. A solução ótima encontrada consegue deslocar a curva de DTR para a direita, o que representa o aumento desejado para os tempos de residência no distribuidor. Ao mesmo tempo, os valores de concentração para

tempos de residência superiores a 2 vezes o tempo teórico de residência ($\theta=2$) são menores do que os da configuração original, o que indica a redução do volume morto.

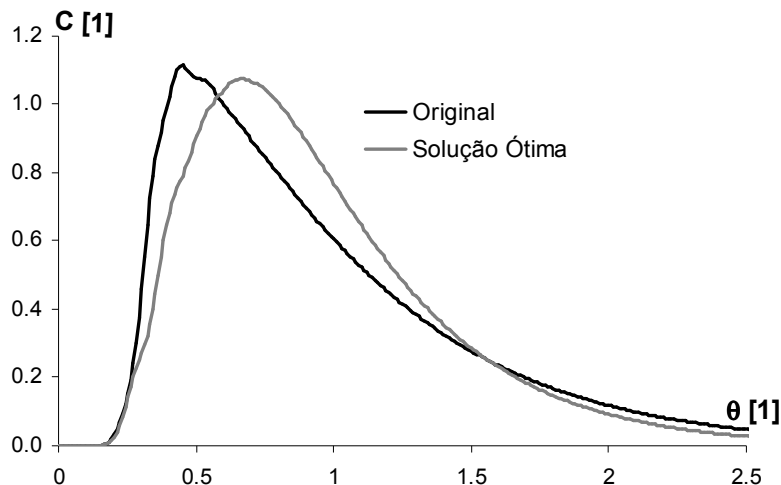


Figura 5.13 – Curvas DTR para a configuração original e melhor configuração encontrada.

O estudo de otimização conseguiu promover melhorias significativas à configuração original, que em muitas situações já poderia ser classificada como uma boa solução.

As técnicas de otimização podem, portanto, ser utilizadas não somente no projeto de novas configurações, mas também no aperfeiçoamento de configurações existentes, promovendo melhorias que poderiam auxiliar na produção de metais com qualidade ainda superiores às atuais.

5.5.1 Redução dos tempos de Processamento

A tabela abaixo apresenta um resumo do desempenho de cada abordagem, e compara o tempo total de processamento com um estudo equivalente que não utilizasse as análises multi-fidelidade. Os dados abaixo representam valores aproximados.

Tabela 5.5-Análise de desempenho da metodologia proposta.

Propriedade	1° Abordagem	2° Abordagem
Análises de alta fidelidade	17	2
Análises de baixa fidelidade	110	100
Tempo total de Processamento*	297h (12 dias)	122h (6 dias)
Tempo equivalente sem análises multi-fidelidade	1397h (58 dias)	1122h (46 dias)
Redução do tempo de processamento	79%	89%

*Considerando a máquina apresentada na seção 5.2

Fica claro, portanto, a grande potencialidade da metodologia na redução do tempo total de processamento quando comparado a estudos equivalentes que não utilizassem as análises multi-fidelidade baseadas em malhas grosseiras. A comparação considera, no entanto, que os estudos utilizam a aproximação por meta-modelos, sobre a qual o algoritmo de otimização é utilizado.

Estudos que aplicassem o algoritmo de otimização diretamente nas análises de alta-fidelidade apresentariam tempos de processamento muitas vezes superiores aos apresentados na tabela acima.

CAPÍTULO 06

CONCLUSÕES

O presente trabalho apresentou uma metodologia para reduzir os custos computacionais envolvidos em estudos de otimização de equipamentos que utilizam soluções numéricas das equações de Navier-Stokes. A metodologia foi aplicada para dimensionamento de distribuidores de lingotamento contínuo.

A metodologia, baseada em soluções aproximadas, aplica os conceitos de análises multi-fidelidade e meta-modelos para simplificar e reduzir o número de análises fluido-dinâmicas realizadas durante o estudo de otimização.

As análises multi-fidelidade baseadas na utilização de malhas com diferentes níveis de refino não somente aceleraram o processo de otimização, mas também permitem que o estudo seja realizado com recursos computacionais menos avançados, enquanto a precisão das soluções é garantida pelas funções de correção.

O fato das análises fluido-dinâmicas serem utilizadas apenas para a construção ou atualização de meta-modelos, e não durante a aplicação dos algoritmos de otimização, permite ainda que o número de análises seja ajustado em função do tempo e recursos disponíveis para o estudo.

Também, pelos algoritmos de otimização serem aplicados em meta-modelos adaptativos, e não nas custosas análise de CFD, permite a utilização de algoritmos de otimização robustos sem encarecer o estudo como um todo.

Os testes realizados no presente trabalho permitiram concluir que as malhas grosseiras apresentam boa capacidade para fornecer resultados qualitativos semelhantes aos da malha refinada, o que contribui para a validade da metodologia proposta.

Os resultados ilustraram que reduções de até 90% do tempo total de processamento podem ser alcançadas com a metodologia proposta neste trabalho, permitindo que estudos que levariam meses sejam resolvidos em poucos dias.

Os resultados mostraram ainda que as funções de correção são fundamentais para a robustez da metodologia, pois permitem que ajustes locais sejam realizados sob o modelo a medida que o estudo avança. Estes ajustes garantem a precisão local das soluções, e que as melhorias observadas no modelo de baixa fidelidade correspondam a melhorias do modelo de alta-fidelidade, isto é, que falsos pontos ótimos sejam eliminados da Fronteira de Pareto.

Para o caso estudado a metodologia também se mostrou robusta em relação a função de correção inicial, o que permitiu que a região ótima de operação seja encontrada com um número mínimo de análises de alta-fidelidade.

Pode-se concluir, portanto, que a metodologia é bastante adequada para redução de custos computacionais em estudos de otimização de distribuidores e, por extensão, a outros problemas que envolvem CFD.

O fato da metodologia não ser baseada em uma simplificação do modelo numérico, mas simplesmente na utilização de malhas grosseiras também permite que a metodologia seja utilizada com modelos mais complexos que possam surgir para o distribuidor ou até mesmo em outras aplicações de mecânica dos fluidos computacional (desde de que eventuais restrições sejam respeitados em relação ao refino de malha).

6.1 Sugestões para trabalhos futuros

Uma simplificação importante que poderia ser avaliada no estudo de otimização de distribuidores consiste na substituição das análises transientes para obtenção das curvas DTR pelo modelo lagrangeano proposto por Daoud (2006).

Neste caso as análises transientes seriam substituídas por análises lagrangeanas em regime permanente, que procuram representar as informações da curva DTR com base no tempo de residência associado a cada partícula. Essa técnica poderia reduzir ainda mais o custo computacional das análises utilizadas este trabalho.

Outra sugestão consiste em utilizar a metodologia apresentada neste trabalho para estudos de otimização que considerariam as incertezas envolvidas nas dimensões do distribuidor, devido ao processo de fabricação do mesmo (tolerâncias construtivas). Estes estudos costumam exigir uma série de avaliações para cada configuração proposta, tornando a redução dos custos computacionais aqui proposta bastante atraente.

Pode-se contestar ainda que as soluções apresentadas pela metodologia proposta neste trabalho consistem numa boa aproximação para encontrar a região ótima do domínio de projeto, mas que não conseguem detectar com precisão a posição exata do ponto ótimo global. Assim, sugere-se que estudos sejam desenvolvidos acoplando a solução obtida com a metodologia aqui apresentada com algoritmos acurados, que permitiriam que o ponto ótimo do domínio fosse encontrado com maior precisão.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] ALEXANDROV, N. M.; LEWIS, R. M.; GUMBERT, C. R.; GREEN, L.L; NEWMAN, P. A. Approximation and Model Management in Aerodynamic Optimization with Variable-Fidelity Models. **Journal of Aircraft**. Vol. 38, No. 6, 2001.
- [2] ANSYS CFX MANUAL, Versão 11.0, Ansys Inc., Waterloo, Canadá, 2006.
- [3] ADRIAN, Ronald J. Twenty Years of Particle Image Velocimetry. In: 12th International Symposium on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics. 2004. Lisboa. **Proceedings of the 12th International Symposium on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics..**
- [4] BARBOSA, F. A.; FILHO, G. M. A.; TAVARES, R. P. Modelagens matemática e física do escoamento do aço líquido em diferentes projetos de distribuidor do lingotamento contínuo da Usiminas. **Tecnologia em Metalurgia e Materiais**, São Paulo, v.1, n.4, p.34-39, abr.- jun. 2005.
- [5] BARTH, T.J; JESPERSEN, D.C. The design and application of Upwind Schemes on Unstructured Meshes. **AIAA-American Institute of Aeronautics and Astronautics**. 1989. AIAA 1989-0366.
- [6] BEJAN, A. **Advanced Engineering Thermodynamics**. Editora Wiley-Interscience. Estados Unidos. 1988. 758p.
- [7] BOX, G. E. P., DRAPER, N. R. **Empirical model-building and response surfaces**, New York. Ed. John Wiley & Sons. 1987. 669p.
- [8] BUHMANN, M. D. **Radial Basis Functions: Theory and Implementations**. Cambridge University Press. 2003. 270pp.
- [9] BURMEISTER, L.C., **Convective Heat Transfer**, Wiley-Interscience Publication. 1983. 790pp.
- [10] CAMPLIM, J. M.; HERBERTSON, J.; HOLL, H.; WHITEHOUSE, P.; GUTHRIE, R.I.L.; HAN, J.W.; HASAN, M. The application of mathematical and water modelling in the selection of tundish design for the Proposed Combicaster at BHP Whyalla. In: **Proceedings of the sixth International Iron and Steel Congress**, 1990. Nagoya: 207-214.

- [11] CHIANG, L. K. In: **Proceedings of the Steelmaking Conference**. TMS, Warrendale, PA. 1992. vol 75. pp.437.
- [12] CHOI S., ALONSO J. J., KROO I. M., WINTZER M. Multi-Fidelity Design Optimization of Low-Boom Supersonic Business Jets. **AIAA-American Institute of Aeronautics and Astronautics**. 2004. AIAA 2004-4371.
- [13] CHUNG H. S., CHOI S., ALONSO J. J., Supersonic Business Jet Design Using Knowledge-based Genetic Algorithm with Adaptive, Unstructured Grid Methodology. In: **21st Applied Aerodynamic Conference**. Orlando, Estados Unidos. 2003. AIAA 2003-3791.
- [14] COHEN, J., COHEN P., WEST, S.G., AIKEN, L.S. **Applied multiple regression/correlation analysis for the behavioral sciences**. Hillsdale, NJ: Ed. Lawrence Erlbaum Associates. 2003. 2nd ed.
- [15] COLAÇO, M. J.; DULIKRAVICH, G. S.; SAHOO, D. A comparison of two methods for fitting high dimensional response surfaces. **IPDO - Inverse Problems, Design and Optimization Symposium**. 2007. Miami Estados Unidos.
- [16] COLEY, D. A. **An Introduction to Genetic Algorithms for Scientists and Engineers**. Editora World Scientific Publishing. 1999. ISBN 981-02-3602-6.
- [17] CRAIG, K. J.; DE KOCK D. J.; MAKGATA, K. W., DE WET, G. J. Design Optimization of a Single-strand Continuous Caster Using Residence Time Distribution Data. 2001. **ISIJ International**. Volume 41, No.10, pp 1194-1200.
- [18] DAOUD, I. L. A. **Estudo Numérico do Comportamento de Inclusões não Metálicas em Distribuidores de Lingotamento Contínuo de Aço**. 2006. 117f. Dissertação (mestrado em Engenharia). Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2006.
- [19] DEB K., PRATAP A., AGARWAL S., MEYARIVAN T. **A Fast and Elitist Multi-Objective Genetic Algorithm: NSGA-II**. KanGAL- Kanpur Genetic Algorithms Laboratory. KanGAL Report Number 2000001. 2000.
- [20] DEBROY, T; SYCHTERZ, J. A. Numerical Calculation of Fluid Flow in a Continuous Casting Tundish. **Metallurgical Transactions**, B, 1985. vol. 16B. pp. 497-504.
- [21] DE KOCK, D. J. **Optimal Tundish Design Methodology in a Continuous Casting Process**. 2005. 120f. Tese (Doutor em Engenharia) . Faculty of Engineering, Built Environment and Information Technology. Universidade de Pretoria, Pretoria, 2005.

- [22] ELDRED, M.; GIUNTA, S.; COLLIS, S. Second-order corrections for surrogate-based optimization with model hierarchies. In: **10th AIAA/ISSMO Multidisciplinary analysis and optimization conference**, AIAA, Albany, New York, 2004.
- [23] ELDRED, M. S.; DUNLAVY, D. M. Formulations for Surrogate-Based Optimization with Data Fit, Multifidelity, and Reduced-Order Models. **11th AIAA/ISSMO Multidisciplinary Analysis and Optimization Conference**. 2006, Portsmouth, Virginia. AIAA 2006-7117.
- [24] FAN, C. M.; PAN, S. M.; WANG, H. S.; HWANG, W. S. Design of single element flow control device in twin strand billet tundish for continuous casting of steel using flow simulation model. **Ironmaking and Steelmaking**, v.29, n.5, p.376-382, 2002.
- [25] FERZIGER, J. H. PERIC, M. **Computational Methods for Fluid Dynamics**. 2nd Ed. Berlim. Editora Springer. 1997. 364 pp.
- [26] FOGLER, H. S. **Elementos de Engenharia das Reações Químicas**. Rio de Janeiro. Editora LTC. 2002. 892p.
- [27] FORRESTER, A. I. J.; BRESSLOFF, N. W.; KEANE A. J. Optimization using surrogate models and partially converged computational fluid dynamics simulations. In: **Proceedings of the Royal Society A**. 2006. pp. 2177–2204.
- [28] FREIRE, A. P. S.; MENUT, P. P. M. ; SU. J. **Turbulência**. In: Anais da I Escola de Primavera em Transição e Turbulência. 2002. Rio de Janeiro.
- [29] GOLDBERG, D. E. **Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning**. Addison-Wesley, Reading MA, 1989. 412pp.
- [30] GIUNTA A. A., **Aircraft Multidisciplinary Design Optimization Using Design of experiments Theory and Response Surface Modeling Methods**. Tese (Doutor em Engenharia). Virginia Polytechnic Institute and State University. Blacksburg, Virginia, 1997.
- [31] GIUNTA A. A. Use of Data Sampling, Surrogate Models, and Numerical Optimization In Engineering Design. **American Institute of Aeronautics and Astronautics-AIAA**. 2002. AIAA 2002-0538
- [32] GROTHJANS, H.; MENTER, F.R. Wall functions for industrial applications. **Computational Fluid Dynamics**. John Wiley Sons. Volume 1, Parte 2. 1998. pp 1112-1117,

- [33] HARDY R.L., Multiquadric Equations of Topography and Other Irregular Surfaces. **Journal of Geophysics Research**. 1971. Vol. 176, pp. 1905-1915.
- [34] HARDY R.L. Theory and applications of the multiquadric biharmonic method: 20 Years of discovery 1968-1988, **Computers Mathematics and Applications** 19. 1990. pp. 163-208.
- [35] HE, Y.; SAHAI, Y. The Effect of Tundish Wall Inclination on the Fluid Flow and Mixing. **Mettalurgical Transactions**. 1987. Vol 18B. pp81-91.
- [36] HE, Y.; SAHAI, Y. Fluid dynamics of continuous casting tundishes – mathematical modeling. **Tundish Metallurgy**, Volume 1. 1990. p.51-60,
- [37] IBS, Instituto Brasileiro de Siderurgia. **Siderurgia Brasileira: Relatório de Sustentabilidade**. 2007. disponível em:<www.ibs.org.br>.
- [38] IISI, International Iron and Steel Institute. **World Steel In Figures 2007**. Disponível em: <www.worldsteel.org>.
- [39] ISHII, T.; KUBO, N.; BOSE, T. K.; IGUCHI, M. Mathematical Modeling of Flow and Inclusion Motion in Vessel with Natural Convection. **ISIJ International**, 2001, Vol 41, No. 10, pp 1174-1180.
- [40] JHA, P. K.; DASH, S. K.; KUMAR; S. Fluid Flow and Mixing in a Six Strand Billet Caster Tundish: A Parametric Study. **ISIJ International**, 2001, Vol 41, No. 12, pp 1437-1446.
- [41] JHA, P. K.; DASH, S. K. Global Optimization of Fluid Flow and Mixing in a Six Strand Billet Caster Tundish. **ISIJ International**, 2002, Vol 41, No. 6, pp 670-672.
- [42] KEMENY, F.; HARRIS, D. J.; MCLEAN, A.; MEADOWCROFT, T. R.; YOUNG, J. D; In:**Proceedings of the 2nd Process Technology Conference**, TMS, Warrendale, PA, 1981. vol 2. pp. 232-245.
- [43] KNOEPKE, J.; MASTERVICH J. In: **Steelmaking Conference Proceedings, ISS-AIME**, TMS, Warrendale, PA, 1986, vol. 69, pp. 777-87.
- [44] KORIA, S. C.; SINGH, S. Physical Modelling of the Flow modifier on the dynamics of Molten Steel Flowing in a Tundish. **ISIJ International**. 1994, Vol 34. No. 10, pp 784-793.
- [45] KUMAR, A.; KORIA, S. C.; MAZUMDAR D.; An assessment of Fluid Flow Modelling and Residence Time Distribution Phenomena in Steelmaking Tundish Systems. **ISIJ International**, 2004, Vol 44, No. 8, pp 1334-1341.

- [46] KUNDU, P. K. **Fluid Mechanics**. 1990. Londres, Reino Unido. Editora Academic Press. 638p.
- [47] LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. The numerical computation of turbulent flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, n.3, 1974. p.269-289,.
- [48] LEVENSPIEL, O. **Engenharia das Reações Químicas**. Volume 1 – Cinética Química Aplicada. São Paulo. Editora Edgard Blücher, 1974, 211p.
- [49] LEWIS, R. M.; NASH, S. G. A Multigrid Approach to the Optimization of Systems Governed by Differential Equations. In: **Proceedings of the 8th AIAA/USAF/NASA/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Optimization**. California, Estados Unidos. 2000. AIAA 2000-4890.
- [50] MACIOL, P.; GAWAD, J.; PODORSKA, D. Arrangement of flow modification devices in continuous casting Tundish Based on Multicriterion optimization. **Archives Of Metallurgy and Materials**. 2007. Volume 52. exemplar 1.
- [51] MADIAS, J; MARTIN, D.; FERREYRA, M.; VILLORIA, R.; GARAMENDY A. Design and Plant Experience Using an Advanced Pouring Box to receive and Distribute the steel in a six strand Tundish. **ISIJ International**, 1999. Vol 39, No. 8, pp 787-794
- [52] MALISKA, C. R.. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. 2nd edição. Rio de Janeiro. Editora LTC. 2004. 453p.
- [53] MATHIEU, J.; SCOTT, J. **An Introduction to Turbulent Flow**. Editora Cambridge. Estados Unidos. 2000 374p.
- [54] MAZUMDAR, D.; GUTHRIE, R. I.L. The Physical and Mathematical Modelling of Continuous Casting Tundish Systems. **ISIJ International**, 1999. Vol 39, No. 6, pp 524-547.
- [55] MENTER F.R. Influence of free stream values on k- ω turbulence model predictions. **AIAA Journal**, 30(6), 1992. pp 1657-1659.
- [56] MENTER F.R. Zonal Two Equation k- ω Turbulence models for Aerodynamic Flows. **American Institute of Aeronautics and Astronautics-AIAA**. 2002. 1993. AIAA 1993-2906.
- [57] MENTER F.R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications. **AIAA-Journal**, 32(8), 1994. pp. 269-289.

- [58] MODEFRONTIER: The Multi-Objective Optimization and Design Environment. Manual do Usuário. Versão 4.0. Esteco srl. Trieste, Itália. 2007. <<http://www.modefrontier.com>>.
- [59] MUJUNDAR, P. M.; SUDHAKAR, K.; MARATHE, A. G.; ISAACS, A.; GHATE, D.; NIGAM, N.; Aerodynamic Design Optimization Studies at CASDE. In: **Proceedings of the Symposium on Applied Aerodynamics and Design of Aerospace Vehicles**. 2003. Bangalore, India
- [60] NASH, S. G. A multigrid approach to discretized optimization problems. **Journal of Optimization Methods and Software**, 2000. pp 99-116.
- [61] ORR, M. J. K. Introduction to Radial Basis Function. Relatório Interno. Universidade de Edinburgh. Disponível em <www.anc.ed.ac.uk/~mjo/papers/intro.ps>. Escócia, Abril de 1996.
- [62] PALAFOX-RAMOS, J.; BARRETO-SANDOVAL, J. J.; LÓPEZ-RAMÍREZ, S.; MORALES, R. D. Melt flow optimization using turbulence inhibitors in large volume tundishes. **Ironmaking and steelmaking**, v.28, n.2, p.101-109, 2001.
- [63] PAPANASTASIOU, T. C.; GEORGIU G. C.; ALEXANDROU, A. N. **Viscous Fluid Flow**. Editora CRC. 1999. Estados Unidos. 539p.
- [64] PARASHAR, S.; FATEH, N. Multi-Objective MDO Solution Strategy For Multidisciplinary Design using modeFRONTIER. **IPDO - Inverse Problems, Design and Optimization Symposium**. 2007. Miami Estados Unidos.
- [65] PARDESHI, R.; BASAK, S.; SINGH, A. K.; BASU, B.; MAHASHABDE, V.; ROY S. K.; KUMAR S.. Mathematical Modeling of the Tundish of a Single-Strand Slab Caster. 2004. **ISIJ International**, 2004. Vol 44, No. 9, pp 1534-1540.
- [66] PATANKAR, S. V. **Numerical Heat transfer and Fluid Flow**. Hemisphere Publishing Corporation. 1980. 210p.
- [67] PEREIRA, A. M.; FRANÇOIS, M. G.; VILELA, A. C. F.; WOLLMANN, A. M.; MADÍAS, Jorge; Effects of Turbulence of Inhibitors on Slag Emulsification in the Continuous Casting Tundish. In: **Steelmaking Conference Proceedings**. Baltimore- Estados Unidos, 2001. Vol 84, pp 127-138.
- [68] RAFFEL, M.; WILLERT, C.; KOMPENHANS, J. **Particle image velocimetry – a practical guide**. Springer Verlag-Berlin Heidelberg NewYork.1998.ISBN 3-540-63683-8.

- [69] RAMOS-BANDERAS, A.; MORALES, R. D.; GARCIA-DEMEDICES, L.; DIAZ-CRUZ, M. Mathematical Simulation and Modeling of Steel Flow with Gás Bubbling in Through Type Tundishes. **ISIJ International**. 2003. Vol. 43, No 5. pp 653-662.
- [70] RAO, S. S.; **Engineering Optimization: Theory and Practice**. Editora John Wiley and Sons, 1996. 920p. ISBN: 978-0-471-55034-1.
- [71] ROBINSON, T.; ELDRED, M.; WILLCOX, K.; HAIMES, R. Strategies for Multi-fidelity Optimization with Variable Dimensional Hierarchical Models. In: **1st Multidisciplinary Design Optimization Specialist Conference**. 2006, Newport, RI. AIAA 2006-1819.
- [72] RODI, W.; SCHEURER, G. Scrutinizing the $k - \epsilon$ turbulence model under adverse pressure gradient conditions. **Journal of Fluids Engineering**. Vol. 108. 1986. pp. 174-179.
- [73] SAHAI, Y.; AHUJA, R. Fluid Flow and Mixing of Melt in Steelmaking Tundishes. **Ironmaking and Steelmaking**. 1986. v.13, n.5, p.241-247.
- [74] SAHAI, Y.; BURVAL, M. D. Validity of Reynolds and Froude similarity criteria for water modeling of melt flow in tundishes. **Electric Furnace Conference Proceedings**. 1992. Vol. 50, p. 469-474
- [75] SAHAI, Y.; EMI, T. Melt Flow Characterization in Continuous Casting Tundishes. **ISIJ International**, 1996. Vol 36, No. 6, pp 667-672.
- [76] SCHNEIDER, G.E.; RAW, M. J. A skewed, positive influence coefficient upwinding procedure for control-volume-based finite element convection-diffusion computation. **Numerical Heat Transfer**, 8:1-26, 1986
- [77] SCHWARZE, R.; OBERMEIER, F.; HANTUSCH, J.; FRANKE, A.; JANKE, D. Mathematical modelling of flows and discrete phase behaviour in a V-shaped tundish. **Steel Research**, v.72, n.5-6, p.215-220, 2001.
- [78] SEAL, H.L. **The historical development of the Gauss linear model**. 1967. Biometrika, 54, 1-23.
- [79] SIEK, J. G.; LUMSDAINE, A. A rational approach to portable high performance: The basic linear algebra instruction set (BLAIS) and the fixed algorithm size template (FAST) library, in Parallel Object Oriented. **Scientific Computing**, ECOOP, 1998.
- [80] SILVA, R. F. A. F.; KRUGER, M.; REIS, M. V. F.; TRINDADE, L. B.; BORGES, R. N.; RIBEIRO, B. A. B.; LARA, G. I.; OLIVEIRA, J. G. Aplicação de Ferramentas de

- Otimização e Dinâmica de Fluidos Computacionais em um Distribuidor de Lingotamento Contínuo. **XXXVII Steelmaking Seminar – International**. 2006.
- [81] SILVA, C. A. ; SILVA, I. A. ; SESHADRI, V. ; PERIM, C. A. ; STEIN, C. R. ; SEGUNDO, H. V. G. ; SILVA, A. B. ; CASTRO, L. S. ; GANDRA, C. A. Caracterização do Escoamento do Aço Líquido no Distribuidor da Máquina de Lingotamento Contínuo Operando em Regime Transiente - Modelagem Física. In: **56o Congresso Anual da ABM Internacional**, 2001.
- [82] SIMPSON, T. W.; MAUERY, T. M.; KORTE, J. J.; MISTREE F. Comparison of Response Surface and Kriging Models for Multidisciplinary Design Optimization. In: **7th AIAA/USAF/NASA/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Analysis & Optimization**, St. Louis, MO, AIAA, Vol. 1, pp. 381-391. 1998. AIAA-98-4755.
- [83] SIMPSON, T. W.; BOOKER, A. J.; GHOSH, D.; GIUNTA, A. A.; KOCH, P. N; YANG R. J. Approximation Methods in Multidisciplinary Analysis and Optimization: A Panel Discussion. In: **9th AIAA/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Analysis & Optimization**. 2002. Atlanta, Estados Unidos.
- [84] SHADE, J.; SMITH, M. P.; PALMER, S. E. Doubling tundish volume at AK Steel's Middletown Works: Structural Criteria, design considerations and operation results. **Ironmaking and Steelmaking**, v.23, n.10, p. 93-103, Oct., 1996.
- [85] SINHA, A. K.; SAHAI, Y. Mathematical Modeling of Inclusion Transport and Removal in Continuous Casting Tundishes. **ISIJ International**, 1993. Vol 33, No. 5, pp 556-566.
- [86] SOLORIO-DÍAZ, G.; MORALES, R. D.; PALAFAX-RAMOS, J.; GARCÍA-DEMEDICES, L.; RAMOS-BANDERAS, A. Analysis of Fluid Flow Turbulence in Tundishes Fed by a Swirling Ladle Shroud. **ISIJ International**, 2004, Vol. 44, No. 6, pp. 1024–1032.
- [87] TASCFLOW. MANUAL, Release 02.12.01, AEA Technology., Waterloo, Canadá, 2002.
- [88] THOMAS, B. G.; BUSCHOW, R.; CAHN, R.; FLEMINGS, M.; ILSCHNER, B.; KRAMER, E.J.; MAHAJAN, S.. Continuous Casting, The Encyclopedia of Materials: Science and Technology. 2001. Elsevier Science Ltd. Oxford, United Kingdom, Vol 2, pp. 1595-1599.
- [89] THOMAS, B. G.; In: Making, Shaping and Treating of Steel, 11 edição. Vol 5. Casting Volume. Editora A. Cramb. **AISE, AISE steel foundation**. 2003. Pittsburgh, PA. p.p 14.1-14.41.
- [90] THOMAS, B. G.; YUAN, Q.; ZHANG, L.; VANKA, S.P. Flow Dynamics and Inclusion Transport in Continuous Casting of Steel. **NSF Design, Service, and Manufacturing**

- Grantees and Research Conf. Proceedings**, San Juan, Puerto Rico. 2003. Ed. University of Alabama, Tuscaloosa, 2003. pp. 2328-2362.
- [91] TOZAWA, H.; KATO, Y.; SORIMACHI, K.; NAKANISHI, T. Agglomeration and Flotation of Alumina Clusters in Molten Steel. . **ISIJ International**, 1999. Vol 39, No. 5, pp 426-434.
- [92] TRIPATHI, A.; AJMANI, S.K. Numerical Investigation of Fluid Flow Phenomenon in a Curved Shape Tundish of Billet Caster. . **ISIJ International**, 2005, Vol. 45, No. 11, pp. 1616–1625.
- [93] VIANA, F. A. C.; STEFFEN, V. J.; BUTKEWITSCH, S. C.; LEAL, M. F. About the Optimum Design Of an Aircraft Pressure Bulkhead by Using Multi-fidelity and Lifecycle algorithm. **IPDO - Inverse Problems, Design and Optimization Symposium**. 2007. Miami Estados Unidos.
- [94] VIESER, V.; ESCH, T.; MENTER, F. Heat Transfer Predictions using Advanced Two-Equation Turbulence Models. **CFX TechnicalMemorandum-CFX-VAL10/0602**. 2002.
- [95] WILCOX D.C. **Turbulence Modeling for CFD**. DCW Industries Inc. Canada, 1993.
- [96] YAMAMOTO, K.; INOUE O. Applications of genetic algorithms to aerodynamic shape optimization. In: **AIAA Computational Fluid Dynamics Conference**. San Diego, Estados Unidos. 1995. AIAA 85-1650-CP.
- [97] YUAN, Q.; THOMAS, B.G. Transport and Entrapment of Particles in Continuous Casting of Steel. In: **3rd International Congress on Science & Technology of Steelmaking**. Association for Iron & Steel Technology. Warrendale, Estados Unidos. 2005. pp. 745-762.
- [98] YEH, J. L.; HWANG, W. S. An improved fluid flow model for slab tundishes and its comparison with a full-scale water model. **Applied Mathematical Modelling**, v.18, jan., p.39-45, 1994.
- [99] ZANG, T. A.; GREEN, L. L. Multidisciplinary Design Optimization Techniques: Implications and Opportunities for Fluid Dynamics Research. **AIAA Fluid Dynamics Conference**, 30, Norfolk, junho 1999. AIAA 99-3798
- [100] ZHANG, L.; THOMAS B. G. Inclusions in Continuous Casting of Steel. **XXIV National Steelmaking Symposium**, Morelia, Mich, Mexico, 26-28, 2003, pp. 138-183.

- [101] ZHONG, L.; LI, B.; ZHU, L.; WANG, R.; WAG, W.; ZHANG, X. Fluid Flow in A Four-strand Bloom Continuous Casting Tundish with Different Flow Modifiers. **ISIJ International**, 2007. Vol 47, No. 1, pp 88-94.
- [102] ZITZLER E., DEB K., THIELE L. Comparison of multiobjective evolutionary algorithms: Empirical results. **Evolutionary Computation Journal**, 8(2), 2000. pp173-195.

APÊNDICES

APÊNDICE 01

MODELO DE TURBULÊNCIA SST

O Modelo SST, proposto por Menter (1994) utiliza o modelo k - ω nas regiões próximas a parede, e o modelo k - ε nas regiões afastadas das mesmas. O modelo k - ω propõe que a viscosidade turbulenta seja descrita em função da energia cinética turbulenta, \tilde{K} , e da frequência turbulenta ω . Para tanto o modelo precisa calcular o valor destas variáveis ao longo do domínio, o que é feito com o auxílio de equações de conservação destas propriedades, apresentadas abaixo:

$$\frac{\partial \rho \tilde{K}}{\partial t} + \underbrace{\nabla(\rho \mathbf{U} \tilde{K})}_A = \underbrace{P_{\tilde{K}}}_P - \underbrace{\beta_1^* \rho \tilde{K} \omega}_X + \underbrace{\nabla((\mu + \sigma_{\tilde{K}1} \mu_t) \nabla \cdot \mathbf{U})}_D \quad (\text{Al.1})$$

$$\frac{\partial \rho \omega}{\partial t} + \underbrace{\nabla(\rho \mathbf{U} \omega)}_A = \underbrace{\frac{\gamma_1}{\mu_t} \rho P_{\tilde{K}}}_P + \underbrace{\nabla((\mu + \sigma_{\omega 1} \mu_t) \nabla \cdot \mathbf{U})}_D - \underbrace{\beta_1 \rho \omega^2}_X \quad (\text{Al.2})$$

na qual os termos representados pelas letras A , P , D e X representam respectivamente a advecção, produção, difusão e destruição da propriedade considerada.

O termo $P_{\tilde{K}}$ representa a produção das propriedades turbulentas em função dos gradientes do escoamento principal, e pode ser escrita na forma:

$$P_{\tilde{K}} = \mu_t (\nabla \otimes \mathbf{U} + (\nabla \otimes \mathbf{U})^T) (\nabla \cdot \mathbf{U}) + \frac{2}{3} \rho \tilde{K} \nabla \cdot \mathbf{U} \quad (\text{Al.3})$$

e γ_1 , $\sigma_{\tilde{K}1}$, $\sigma_{\omega 1}$, β_1 , β_1^* , representam constantes obtidas a partir da validação com resultados experimentais, e neste caso assumem os respectivos valores de 0,5532; 2,0; 2,0; 0,0750 e 0,09 [Vieser, Esch e Menter 2002].

Para permitir o acoplamento entre os modelos Menter (1994) propõe uma transformação ao modelo $k\varepsilon$, que agora passa a ser descrito em uma formulação $k - \omega$, apresentada abaixo [Menter 1993]:

$$\frac{\partial \rho \tilde{K}}{\partial t} + \underbrace{\nabla(\rho \mathbf{U} \tilde{K})}_A = \underbrace{P_{\tilde{K}}}_P - \underbrace{\beta_2^* \rho \tilde{K} \omega}_X + \underbrace{\nabla((\mu + \sigma_{\tilde{K}2} \mu_t) \nabla \cdot \mathbf{U})}_D \quad (\text{Al.4})$$

$$\frac{\partial \rho \omega}{\partial t} + \underbrace{\nabla(\rho \mathbf{U} \omega)}_A = \underbrace{\frac{\gamma_2}{\mu_t} \rho P_{\tilde{K}}}_P + \underbrace{\nabla((\mu + \sigma_{\omega 2} \mu_t) \nabla \cdot \mathbf{U}) + F_{k\varepsilon}}_D - \underbrace{\beta_2 \rho \omega^2}_X \quad (\text{Al.5})$$

na qual os termos representados pelas letras A , P , D e X representam uma vez mais a advecção, produção, difusão e destruição da propriedade considerada.

O termo $P_{\tilde{K}}$ continua sendo representado pela equação Al.3, e o termo $F_{k\varepsilon}$ representa a diferença entre o modelo $k\omega$ original e a formulação obtida a partir do modelo $k\varepsilon$. Esse termo pode ser escrito na forma:

$$F_{k\varepsilon} = 2\rho\sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \nabla \tilde{K} \cdot \nabla \omega \quad (\text{Al.6})$$

e γ_2 , $\sigma_{\tilde{K}2}$, $\sigma_{\omega 2}$, β_2 , β_2^* , representam constantes obtidas a partir da validação com resultados experimentais, e neste caso assumem os respectivos valores de 0,4403; 1,0; 1.168; 0,0828 e 0,09 [Vieser, Esch e Menter 2002].

A transição entre os modelos é realizada com o auxílio de uma função F_1 , que varia entre 1 nas proximidades da parede, e 0 nas regiões livres de cisalhamento (afastadas da parede).

As equações finais do modelo são obtidas por:

$$\begin{cases} G \times (F_1) + H \times (1 - F_1) \\ I \times (F_1) + J \times (1 - F_1) \end{cases} \quad (\text{Al.7})$$

nas quais G , H , I e J representam respectivamente as equações Al.1, Al.4, Al.2 e Al.5, e a função F_1 é avaliada pelas equações:

$$F_1 = \tanh(\arg_1^4) \quad (\text{Al.8})$$

$$\arg_1 = \min\left(\frac{500\mu}{\rho y^2 \omega}, \frac{4\rho\sigma_{\omega 2}\tilde{K}}{CD_{k\omega}y^2}\right) \quad (\text{Al.9})$$

na qual y representa a distância normal à parede, e:

$$CD_{k\omega} = \max(F_{k\varepsilon}; 1,0e^{-10}) \quad (\text{Al.10})$$

o que segundo Menter(1994) garante que F_1 seja zero para $y^+ > 70$.

A viscosidade turbulenta, que consiste no objetivo do modelo, é então calculada pela equação:

$$\mu_t = \rho \frac{a_1 \tilde{K}}{\max(a_1 \omega, \sqrt{2} \cdot |\nabla \otimes \mathbf{U} + (\nabla \otimes \mathbf{U})^T| \cdot F_2)} \quad (\text{Al.11})$$

na qual $a_1 = 0.31$, e

$$F_2 = \tanh(\arg_2^2) \quad (\text{Al.12})$$

sendo que:

$$\arg_2 = \max\left(2 \frac{\sqrt{k}}{\beta^* \omega y}, \frac{500\mu}{\rho y^2 \omega}\right) \quad (\text{Al.13})$$

APÊNDICE 02

REGRESSÃO LINEAR BASEADA NO MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS

Considere a função desconhecida $F(x)$, a qual se deseja aproximar por um modelo baseado em regressões lineares, que fornecerá uma resposta aproximada identificada por $\tilde{f}(x)$.

No caso particular das regressões lineares, os modelos aproximados são descritos na forma:

$$\tilde{f}(x) = \sum_{i=0}^m \Omega_i h_i(x) \quad (\text{AII.1})$$

na qual o número de termos do somatório está relacionado ao modelo escolhido para representar a função $F(x)$ e Ω_i representam os coeficientes que devem ser determinados pela aproximação. No caso de aproximações por funções polinomiais, por exemplo, o índice i do somatório está relacionado à ordem do polinômio, e as variáveis Ω_i e $h_i(x)$ estariam relacionadas respectivamente aos coeficientes e termos do polinômio.

Assim, na aproximação por uma parábola:

$$\tilde{f}(x) = ax^2 + bx + c \quad (\text{AII.2})$$

Os coeficientes a serem determinados pela aproximação são $\Omega = [a \ b \ c]$, e as funções $h_i(x)$ são $\mathbf{h}(x) = [x^2 \ x \ 1]$.

É importante destacar que apesar da função aproximada representar um polinômio de segundo grau, a aproximação é identificada como uma regressão linear, já que a relação entre a variável dependente \tilde{f} e a variável independente x é uma função linear dos parâmetros que se deseja determinar $(\Omega_0, \Omega_1, \Omega_2)$ [COHEN et al 2003].

As aproximações podem não passar por todos os pontos utilizados para construção do meta-modelo, e assim os valores do erro entre a função aproximada e a função real, $F(x)$, devem ser considerados, de maneira que:

$$F(x_i) = \tilde{f}(x_i) + \varepsilon(x_i) \quad (\text{AII.3})$$

Para determinar os valores dos coeficientes Ω_i é necessário que o valor da função $F(x)$ seja conhecido em um número finito de pontos.

Com base nestes pontos o erro associado à aproximação pode ser avaliado com base na diferença entre os valores de $F(x)$ e $\tilde{f}(x)$.

Para um número de pontos n , a equação All.3 pode ser colocada na forma matricial abaixo:

$$\begin{bmatrix} F(x_1) \\ F(x_2) \\ F(x_3) \\ \vdots \\ F(x_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1m} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2m} \\ h_{31} & h_{32} & \cdots & h_{3m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{n1} & h_{n2} & \cdots & h_{nm} \end{bmatrix} \bullet \begin{bmatrix} \Omega_1 \\ \Omega_2 \\ \vdots \\ \Omega_m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix} \quad (\text{All.4})$$

ou ainda

$$\mathbf{F} = \mathbf{H}\mathbf{\Omega} + \mathbf{\varepsilon} \quad (\text{All.5})$$

É importante destacar que o número de pontos selecionados para monitoramento não precisa ser igual ao número de termos escolhidos para a função $\tilde{f}(x)$, embora este seja o caso para as aproximações baseadas em Funções de Base Radial.

Parâmetros importantes associado à aproximação dada pela equação All.3 consistem na média dos erros e somatório dos erros ao quadrado, apresentados a seguir:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\varepsilon_i) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (F(x_i) - \tilde{f}(x_i)) \quad (\text{All.6})$$

$$S = \sum_{i=1}^n (\varepsilon_i)^2 = \sum_{i=1}^n (F(x_i) - \tilde{f}(x_i))^2 \quad (\text{All.7})$$

O teorema de Gauss-Markov afirma que para regressões lineares não enviesadas, isto é, com média dos erros nula, a melhor estimativa para os coeficientes $\mathbf{\Omega}$ é aquela que apresenta o menor somatório dos erros ao quadrado [Seal 1967].

Este teorema dá origem ao método dos ajustes por mínimos quadrados, popularmente conhecidos na modelagem de problemas estatísticos¹.

A grande vantagem deste teorema é a que os coeficientes $\mathbf{\Omega}$ da regressão linear podem ser obtidos de maneira exata ao igualar a zero as derivadas parciais da equação All.7 em relação aos coeficientes Ω_i ,

Utilizando a notação indicial esta operação pode ser representada na forma:

$$\frac{\partial S}{\partial \Omega_j} = \sum_{i=1}^n 2(\tilde{f}(x_i) - F(x_i)) \cdot \frac{\partial \tilde{f}(x_i)}{\partial \Omega_j} \quad (\text{All.8})$$

¹ Os modelos que se enquadram nesta categoria são identificados pelo acrônimo BLUE-*Best Linear Unbiased Estimator*, ou “Melhor Estimador Linear não enviesado”. São lineares pois baseiam-se numa regressão linear, não enviesados pois apresentam média dos erros nula, e são os melhores pois apresentam a menor variância para os erros.

na qual a regra da cadeia foi aplicada, e lembrando ainda que $\partial F(x)/\partial \Omega_i = 0$.

Recorrendo à equação All.2, percebe-se que a última derivada da equação acima é igual a $h_j(x)$, e a equação acima se resume à:

$$\sum_{i=1}^n \tilde{f}(x_i) \cdot h_j(x_i) = \sum_{i=1}^n F(x_i) \cdot h_j(x_i) \quad (\text{All.9})$$

As equações para os diferentes índices j podem então ser agrupadas e escritas na forma matricial:

$$\mathbf{H}^T \cdot \tilde{\mathbf{f}} = \mathbf{H}^T \cdot \mathbf{F} \quad (\text{All.10})$$

Ao substituir o valor da função aproximada $\tilde{\mathbf{f}}$, resulta em:

$$\mathbf{H}^T \cdot (\mathbf{H} \cdot \mathbf{\Omega}) = \mathbf{H}^T \cdot \mathbf{F} \quad (\text{All.11})$$

Ou ainda:

$$(\mathbf{H}^T \cdot \mathbf{H}) \cdot \mathbf{\Omega} = \mathbf{H}^T \cdot \mathbf{F} \quad (\text{All.12})$$

Que pode ser resolvido diretamente para $\mathbf{\Omega}$ pela inversão do produto matricial $\mathbf{H}^T \cdot \mathbf{H}$, resultando na forma:

$$\mathbf{\Omega} = (\mathbf{H}^T \cdot \mathbf{H})^{-1} (\mathbf{H}^T \cdot \mathbf{F}) \quad (\text{All.13})$$

No caso particular das aproximações por funções de base radial, os erros observados nos pontos utilizados para a construção do meta-modelo são nulos, e desta maneira a obtenção dos coeficientes pode ser obtida de maneira direta pela equação All.4, que para o caso das funções de base radial ficaram iguais a:

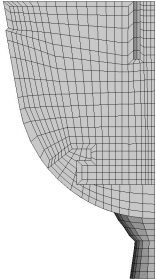
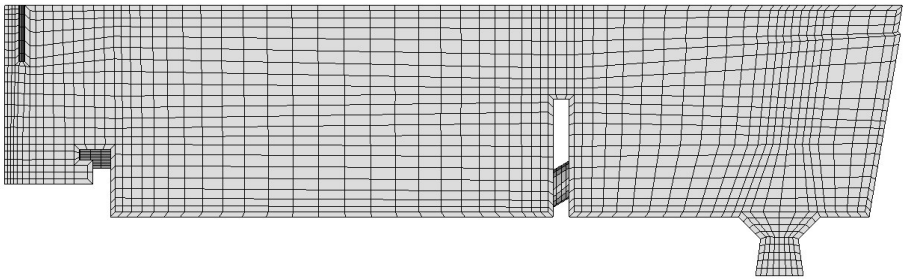
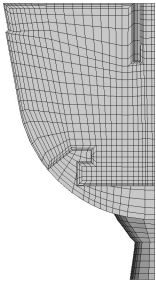
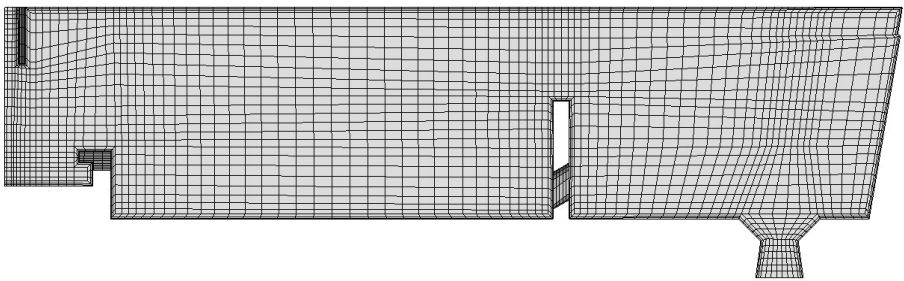
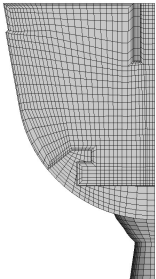
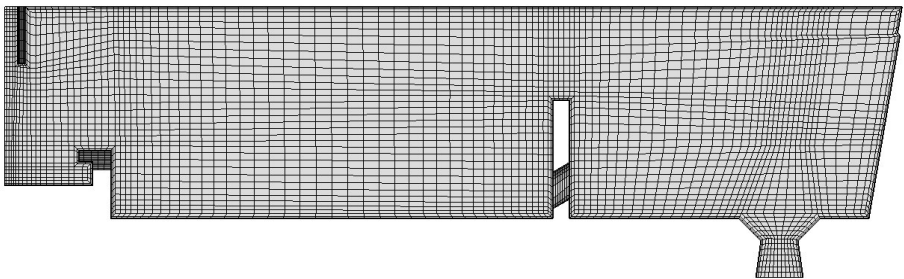
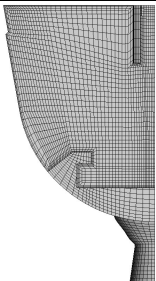
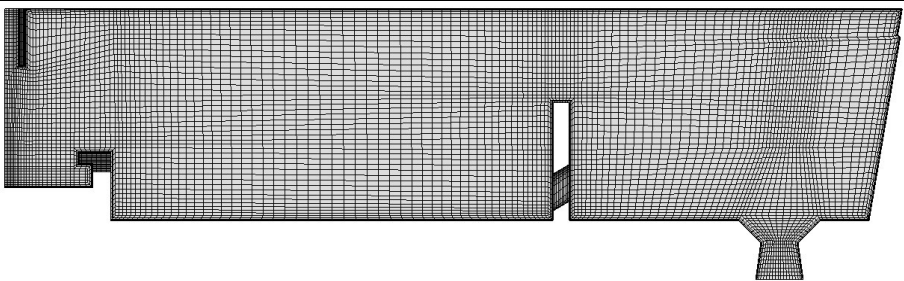
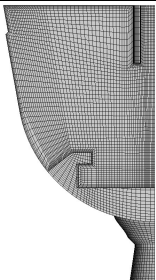
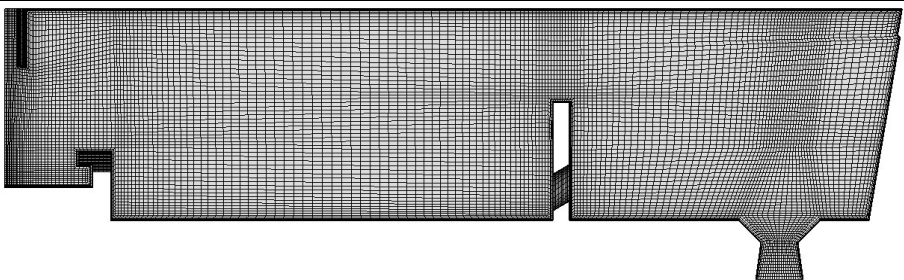
$$\begin{bmatrix} F(x_1) \\ F(x_2) \\ F(x_3) \\ \vdots \\ F(x_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1m} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2m} \\ h_{31} & h_{32} & \cdots & h_{3m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{n1} & h_{n2} & \cdots & h_{nm} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Omega_1 \\ \Omega_2 \\ \vdots \\ \Omega_m \end{bmatrix} \quad (\text{All.14})$$

ou ainda

$$\mathbf{F} = \mathbf{H} \mathbf{\Omega} \quad (\text{All.15})$$

APÊNDICE 03
MALHAS UTILIZADAS

Seguem abaixo figuras ilustrando as malhas utilizadas no presente trabalho.

25 mil nós		
50 mil nós		
100 mil nós		
250 mil nós		
500 mil nós		

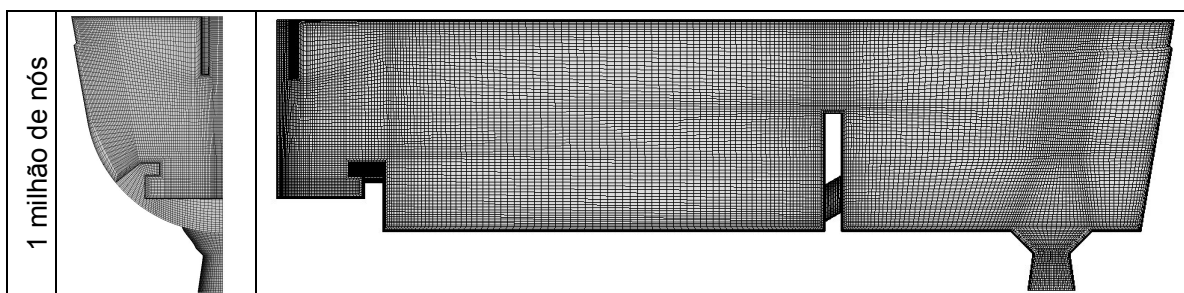


Figura AIII.1-Malhas Utilizadas no estudo de convergência de malha.

APÊNDICE 04

ESTUDO DE CONVERGÊNCIA DO PASSO DE TEMPO

Os passos de tempo utilizados nas análises transientes para obtenção das curvas DTR foram determinados em função de um estudo de convergência das funções objetivo em função deste parâmetro.

Os passos de tempo analisados representam uma fração do tempo teórico de residência, assumindo os seguintes valores: $T/50$, $T/100$, $T/250$, $T/500$ e $T/1000$.

O gráfico a seguir ilustra a variação das funções objetivo para os diferentes passos de tempo.

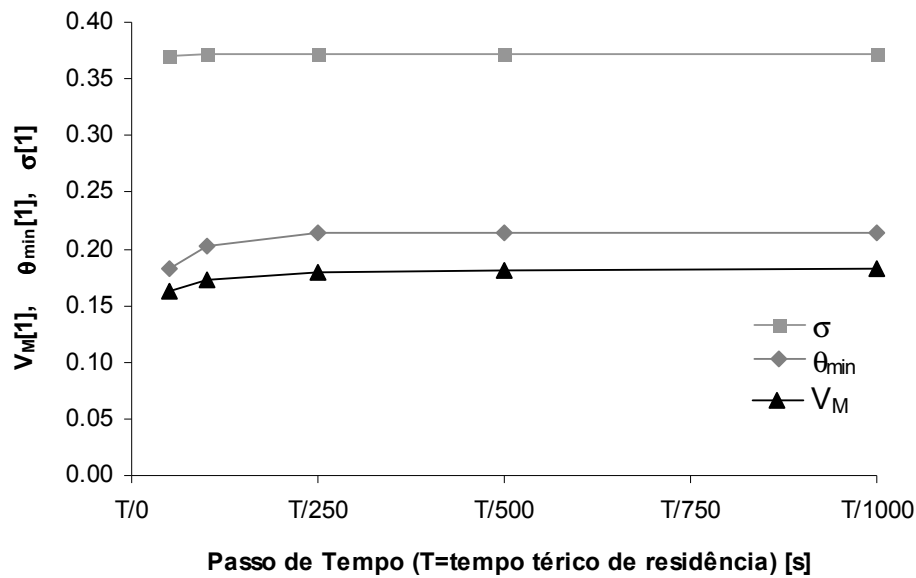


Figura AIV.1-Convergência das funções objetivo em função do passo de tempo.

Em seguida os valores foram confrontados com a solução obtida no menor passo de tempo ($T/1000$), e o erro percentual relacionado a cada passo de tempo foi então calculado na forma:

$$|erro\%| = \frac{|R_{\Delta t} - R_{\Delta t MIN}|}{R_{\Delta t MIN}} \quad (AIV.1)$$

na qual $R_{\Delta t}$ representa o resultado obtido para cada passo de tempo, e $R_{\Delta t MIN}$ o resultado obtido com o menor passo de tempo ($T/1000$).

Os valores dos erros são ilustrados na figura abaixo.

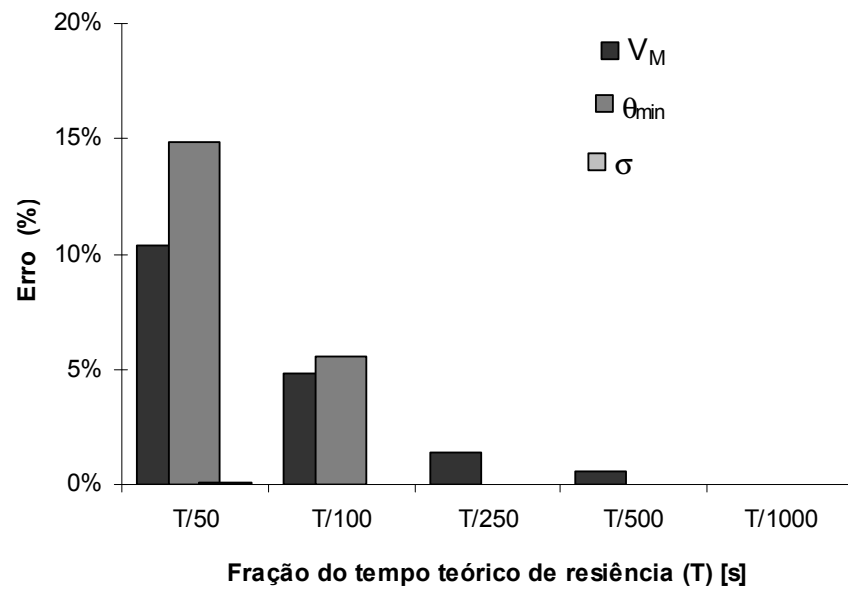


Figura AIV.2- Erros observados para cada passo de tempo.

Utilizando uma vez mais o critério de erros da ordem de grandeza de 5% o passo de tempo selecionado para cálculo da DTR foi o $T/100$.